

Titre: Mesure et caractérisation du mélange dans les systèmes
Title: granulaires denses

Auteur: Jocelyn Doucet
Author:

Date: 2008

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Doucet, J. (2008). Mesure et caractérisation du mélange dans les systèmes
Citation: granulaires denses [Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal].
PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/8132/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/8132/>
PolyPublie URL:

**Directeurs de
recherche:**
Advisors:

Programme: Non spécifié
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MESURE ET CARACTÉRISATION DU MÉLANGE DANS LES SYSTÈMES
GRANULAIRES DENSES

JOCELYN DOUCET

DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIAE DOCTOR (Ph. D.)
(GÉNIE CHIMIQUE)

AVRIL 2008



Library and
Archives Canada

Bibliothèque et
Archives Canada

Published Heritage
Branch

Direction du
Patrimoine de l'édition

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

ISBN: 978-0-494-41746-1

Our file Notre référence

ISBN: 978-0-494-41746-1

NOTICE:

The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

AVIS:

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.

UNIVERSITÉ DEMONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DEMONTRÉAL

Cette thèse intitulée :

MESURE ET CARACTÉRISATION DU MÉLANGE DANS LES SYSTÈMES
GRANULAIRES DENSES

présentée par : DOUCET Jocelyn

en vue de l'obtention du diplôme de : Philosophiae Doctor

a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de :

M. LEGROS Robert, Ph. D., président

M. CHAOUKI Jamal, Ph. D., membre et directeur de recherche

M. BERTRAND François, Ph. D., membre et codirecteur de recherche

M. TANGUY Philippe, Ph. D., membre

M. BRIENS Cédric, Ph. D., membre

Toutes les grandes actions et toutes les grandes pensées ont un commencement dérisoire. Les grandes oeuvres naissent souvent au détour d'une rue dans le tambour d'un restaurant. Ainsi de l'absurdité. Le monde absurde plus qu'un autre tire sa noblesse de cette naissance misérable.

- Albert Camus

Rares sont les esprits assez maîtres d'eux-mêmes pour voir les faiblesses et les folies de leurs contemporains sans tomber dans les mêmes pièges.

- Albert Einstein

Personne ne peut se sentir héroïque sans avoir été d'abord rejeté par le monde ou peut-être sans avoir accompli soi-même cette exclusion.

- Glenn Gould

-À ma mère et mon père

Remerciements

Quand j'ai commencé mes études, je n'aurais jamais pensé un jour écrire une thèse sur une chose somme toute aussi banale que le sujet de celle-ci. La complexité du monde qui nous entoure est telle qu'elle s'amplifie après chaque page tournée, après chacune des sessions d'étude, après toutes ces années. Les connaissances nous procurent un regard nouveau, elles nous font voir des détails qui autrement nous échappent, elle nous font apprécier la complexité de ses éléments et l'harmonie avec laquelle elle s'organise.

Cette thèse est d'abord un accomplissement personnel, motivé par un désir de dépassement. Ce parcours aurait toutefois été impossible sans la rencontre et l'assistance de nombreuses personnes qui me sont chères, à commencer -sans tomber dans le cliché- par ma mère, Luce, mon père Robert et mes deux soeurs Annie et Marie-Christyne. Des amis et collègues, Marc Lemieux, Guillaume Léonard, Louis-Alexandre Leclaire, sans qui tout le travail aurait été plus long et plus difficile. De récents étudiants et amis, Olivier et Jonathan avec qui j'ai pu partager certaines difficultés et apporter des réponses à quelques questions. Un remerciement aussi à Nicolas Hudon avec qui j'ai pu discuter de nombreux sujets et mener à terme quelques idées. Un merci spécial à Dominique Leroux pour les corrections de ce manuscrit.

Un merci particulier à Guy et Cécile qui m'ont toujours accueilli à bras ouverts.

Mes quelques amis, Ghislain, Benoît, Richard, sans oublier le grand art qui aura su me tenir vivant durant cette traversée -à ce titre un merci particulier à Madeleine et Catherine.

J'aimerais aussi souligner la confiance, la latitude et la liberté scientifique qui m'ont été données tout au long de cette thèse. Sans cette liberté, ces sessions d'idées nouvelles, il aurait été impossible de mener à terme plusieurs des idées présentées dans cette thèse. À ce titre, je remercie mes directeurs de thèse Jamal Chaouki et François Bertrand.

La thèse a été financée par une bourse de doctorat (ES-D) du conseil de recherche en sciences naturelles et génie (CRSNG).

Résumé

Cette thèse développe des outils de caractérisation du mélange dans le cas spécifique, mais sans se limiter aux systèmes composés de matériaux granulaires.

Dans un premier temps, la méthode de suivi de particules radioactives (RPT) est généralisée à des géométries complexes à plus de deux (2) dimensions. La méthode précédente ne s'appliquait qu'à des géométries cylindriques verticales, le plus souvent pour l'étude de lits fluidisés ou de réacteurs polyphasiques. L'algorithme numérique est présenté en détails et appliqué au cas d'un mélangeur à dimension supérieure à trois (3). À partir de ces données, des outils basés sur la théorie du chaos sont appliqués, suivant les travaux majeurs effectués par Ottino (1989). On y montre en particulier comment calculer les dimensions, entropies et exposants de Lyapunov à partir de l'hypothèse ergodique appliquée aux mesures lagrangiennes obtenues à l'aide de la RPT.

Les éléments issus de la théorie du chaos ne suffisent pas à dériver des courbes de mélange permettant d'obtenir des temps de mélange macroscopiques en raison des échelles différentes (spatiales et temporelles) à partir desquelles s'appliquent ces méthodes. Cette thèse présente une approche originale permettant de dériver une mesure invariante du mélange basée sur deux définitions nouvelles de mélange à l'échelle macroscopique (i.e. à l'échelle spatiale et temporelle du mélangeur et du

temps de circulation, respectivement). Cette mesure permet, en particulier, de déterminer les axes principaux de mélange ainsi que la borne supérieure de la courbe de mélange, basée sur les mesures d'indices de ségrégation proposées par Danckwerts (1952).

Les matériaux granulaires opposent beaucoup de difficultés aux méthodes de mesure basées sur le suivi de particules. Ceci provient du fait que ces systèmes sont sensibles à la différence entre les propriétés des particules, cette différence se reflétant en une ségrégation sélective. Le système devient donc non-ergodique et contrevient à l'hypothèse fondamentale à la base de la méthode de RPT. Cette thèse propose une alternative originale permettant de contourner cette limitation. Plutôt que de suivre une seule particule, comme le fait la RPT, nous développons une méthode suivant un groupe de particules. À l'aide d'un algorithme, la concentration de traceurs à travers l'ensemble du mélangeur peut être obtenue en fonction du temps d'une manière complètement non-intrusive avec une erreur inférieure à 0.005%. Les temps de mélange radial et axial ainsi que les coefficients de diffusion peuvent être dérivés à l'aide de cette technique.

La deuxième partie de cette thèse discute des modèles basés sur la méthode des éléments discrets pour la simulation des matériaux granulaires denses en régime d'écoulement. Nous proposons une discussion sur la vérification et la validation de ce modèle en comparant les résultats obtenus lors d'une décharge de silo avec des résultats publiés dans la littérature. Nous mettons en évidence que les géométries de trémies avec différents angles de décharge présentent une sensibilité sélective aux coefficients de friction mur-particules et particules-particules. Nous montrons aussi que le débit de sortie est très sensible aux coefficients de friction. Nous proposons également une analyse de l'effet du pas de temps utilisé pour l'intégration sur la précision des simu-

lations, et plus particulièrement, nous montrons que l'erreur se répercute également dans la prédiction des temps de mélange et des temps de circulation.

Finalement, cette thèse propose un modèle basé sur les chaînes de Markov discrètes pour la simulation, mais principalement pour l'analyse du mélange dans des systèmes granulaires. En particulier, nous montrons qu'il existe une chaîne de Markov qui peut représenter le mélange dans un système ergodique et que la matrice de transition reliée à cette chaîne de Markov peut être utilisée pour quantifier le mélange. Le vecteur propre associé à la valeur propre maximale de cette matrice représente l'état invariant, ou l'état mélangé du système. La seconde valeur propre maximale représente le taux de convergence géométrique de cette chaîne vers l'état invariant. On montre également que l'entropie de Kolmogorov-Sinai et l'entropie de Ruelle, qui sont les bornes inférieures et supérieures de la somme des exposants de Lyapunov, sont obtenues à l'aide de cette matrice, suivant les travaux de Gaspard (1998).

Abstract

This thesis develops fundamental tools for the characterization of mixing in the case of, without being limited to, granular flows.

The first chapter presents a method based on radioactive particle tracking (RPT) and this chapter generalizes this approach to complex systems of more than two (2) dimensions. Details of the theoretical approach and the algorithm are presented. The nature of the signal obtain enables a thorough analysis of the particle trajectories by recursing to chaos theory and Lagrangian turbulence (Ottino, 1989). We also present the details related to the computation of attractor dimensions, entropies and Lyapunov exponents by assuming that ergodicity as a fundamental hypothesis to extrapolate the Lagrangian measurements to the entire class of particles.

Elements from chaos theory however fail in providing mixing curves at the macroscopic scale (for both time and space). Current approaches for the calculation of the intensity of segregation are based on Danckwerts (1952). These indexes have major issues related to the invariance of the measure. This research presents two (2) new definitions for mixing for granular materials and a new measure is developed by using principal component analysis and provides an invariant measure of mixing with strong connection with space and properties of the particles. The derived measure is also found to be an upper bound of the mixing curve.

As a result from the presence of segregation in dense granular flows, conventional particle tracking methods are not very suitable for investigation of mixing systems dealing with large particle size distributions. This is due to the fact that the system is no longer ergodic as per classes of particle size are driven into specific subregions of the domain and remain trapped. This research developed a new approach which relies on a cluster of radioactive particles. These particles have the same particle size distribution as the inert particles in the system, which makes this approach more suitable for dense granular assemblies. As a result, the concentration of radioactive tracer introduced initially across the system can be precisely monitored with an error less than 0.005% in weight.

Second part of the thesis is oriented on mathematical models and simulation methods for mixing of dense granular systems. It discusses aspects of the verification and validation of the models using a conventional benchmark, the discharge of silos and hoppers. An important result shows that there is a selective sensitivity upon the particle-particle and particle-wall friction coefficient. These parameters were found to have the most sensitivity on the model. We also investigate the effect of the time step on the velocity profiles, granular temperature profiles and mixing curves. We conclude that the minimum time step derived from the Hertz contact law yields in wrong simulations results, even at a macroscopic scale, like the circulation time and the rate of decay of the mixing curve.

Finally, this thesis proposes a new model based on Markov chain theory to simulate mixing of granular particles. This approach is similar to that of the mapping functions. However, by using the Markov chain formalism, some important characteristics of mixing can be derived directly from the transition matrix. As a result, we show that the invariant state of the system (or well-mixed state) can be obtained from the eigenvec-

tors of the Hamiltonian. The rate of mixing and the mixing time can be obtained from the second largest eigenvalue. Also, upper and lower bound for the sum of Lyapunov exponents are obtained from the K-S and Ruelle entropies that can be extracted from the operator (Gaspard, 1998).

Table des matières

Citations	iv
Dédicace	v
Remerciements	vii
Résumé	x
Abstract	xiii
Table des matières	xiv
Liste des tableaux	xxi
Liste des figures	xxii
Liste des sigles et abréviations	xxx
Chapitre 1 Introduction	1
1.1. Contexte	1
1.2. Motivation de la thèse	3

1.2.1. Mesure et validation	3
1.2.2. Le mélange	4
1.3. Objectif principal de la thèse	6
1.4. Structure de la thèse	7
1.4.1. Développement de méthodes expérimentales	7
1.4.2. Développement d'une mesure de mélange	7
1.4.3. Modélisation des écoulements granulaires	8
Chapitre 2 Généralisation de la méthode de RPT aux systèmes complexes. . .	10
2.1. Contexte	10
2.2. Modèle théorique	12
2.2.1. Le modèle phénoménologique	13
2.2.2. Calcul de l'efficacité	14
2.2.3. Généralisation aux systèmes à frontières irrégulières	17
2.2.4. Reconstruction des trajectoires lagrangiennes	19
2.3. Protocole expérimental	20
2.3.1. Matériel	20
2.3.2. Calibration	22
2.4. Résultats et analyse	23
2.4.1. Effet de l'interface	23
2.4.2. Validation	25
2.4.3. Analyse de sensibilité	28
2.4.4. Champ de vitesses moyennes	28
2.5. Conclusion du chapitre	31

Chapitre 3	Application de la théorie du chaos en mélange granulaire	33
3.1.	Contexte	33
3.2.	Introduction	34
3.3.	Le théorème ergodique	34
3.4.	Définition de chaos	35
3.5.	Mesure du chaos par analyse des signaux	37
3.5.1.	Dimension de l'attracteur	38
3.5.2.	Exposant caractéristique	42
3.5.3.	Entropie de Kolmogorov	44
3.5.4.	Sections de Poincaré	45
3.6.	Vérification de l'implantation	47
3.6.1.	Présentation des systèmes étudiés	47
3.6.2.	Dimension de l'attracteur	48
3.6.3.	Indice de Lyapunov maximal	49
3.6.4.	Entropie	50
3.7.	Application à deux systèmes de mélange à retournement	51
3.8.	Résultats et discussion	52
3.9.	Conclusion du chapitre	56
Chapitre 4	Définition d'une mesure pour le mélange granulaire	58
4.1.	Contexte	58
4.2.	Mesures de mélange	62
4.3.	Définition de mélange	65
4.4.	Développement de la mesure	67
4.4.1.	Cas du mélange au sens restreint (MSR)	67

4.4.2. Généralisation au cas du mélange au sens large (MSL)	71
4.5. Application aux mélangeurs modèles	72
4.5.1. Mélange de particules monodisperses avec RPT	72
4.5.2. Mélange de particules bidisperses avec la DEM	76
4.5.3. Mélange de fluides dans un Kenics	77
4.6. Conclusion du chapitre	79
Chapitre 5 Extension de la RPT aux poudres fines.	82
5.1. Contexte	82
5.2. Méthodologie proposée	84
5.3. La méthode BRPT (Bulk Radioactive Particle Tracking)	86
5.3.1. Dispersion radiale	87
5.3.2. Dispersion axiale	88
5.3.3. Analyse de la concentration par échantillonnage radioactif	91
5.4. Matériel et méthode	92
5.4.1. Fabrication du traceur	92
5.4.2. Activation du traceur	93
5.4.3. Système d'acquisition	94
5.5. Résultats et discussion	96
5.5.1. Mélange radial	96
5.5.2. Mélange axial et profils de concentration	98
5.5.3. Mesures par échantillonnage radioactif	99
5.6. Conclusion du chapitre	99

Chapitre 6	Vers une vérification et validation de la méthode des éléments	
	discrets	102
6.1.	Contexte	102
6.2.	Le modèle	104
6.3.	Les systèmes à l'étude	106
6.4.	Résultats et analyse	107
6.4.1.	Champs de vitesses moyennes	107
6.4.2.	Vérification avec Rycroft et al. (2006)	113
6.4.3.	Effet du coefficient de friction	117
6.5.	Conclusion du chapitre	124
Chapitre 7	Analyse d'erreur et analyse dimensionnelle	126
7.1.	Contexte	126
7.2.	Vidange d'un silo	128
7.3.	Application à un mélangeur cylindrique	133
7.4.	Analyse dimensionnelle	136
7.4.1.	Collision simple	136
7.4.2.	Cas à collisions multiples	137
7.4.3.	Composante tangentielle : effet du coefficient de friction	139
7.5.	Erreur numérique : cas simple	140
7.5.1.	Borne supérieure pour l'erreur	140
7.5.2.	Résultats	142
7.5.3.	HSLV vs Euler	143
7.6.	Conclusion du chapitre	144

Chapitre 8	Modélisation du mélange granulaire par chaînes de Markov	146
8.1.	Contexte	146
8.2.	Définition d'un processus de Markov	149
8.2.1.	Construction du processus de Markov	150
8.2.2.	Application au mélange granulaire	152
8.3.	Résultats et discussion	154
8.3.1.	Effet du pas de temps du processus de Markov	155
8.3.2.	Effet du nombre d'états	157
8.3.3.	Effet du temps d'apprentissage	161
8.4.	Conclusion du chapitre	164
Chapitre 9	Propriétés de mélange des systèmes granulaires markoviens	166
9.1.	Théorème de la limite des chaînes de Markov	167
9.1.1.	Existence et unicité	168
9.1.2.	Taux de convergence et mélange	170
9.2.	Chaos et chaînes de Markov	171
9.3.	Exemples	173
9.3.1.	Exemple simple non trivial	173
9.3.2.	Mélange statique	175
9.3.3.	Mélange dans un cylindre en rotation	177
9.4.	Conclusion du chapitre	180
Chapitre 10	Conclusion et recommandations.	183
10.1.	Conclusion générale	183
10.2.	Travaux futurs	185

Références	190
-----------------------------	-----

Liste des tableaux

3.1. Systèmes chaotiques étudiés	47
3.2. Dimensions des attracteurs obtenus par notre implantation et comparaison avec la littérature	50
3.3. Indices de Lyapunov maximaux	51
3.4. Entropie métrique pour différents attracteurs	51
3.5. Valeurs de ν pour des valeurs croissantes de m	54
5.1. Coefficients de dispersion calculés pour les particules de 200 et 750 microns à 15 RPM.	96
5.2. Paramètres de décroissance du modèle de mélange.	98
5.3. Concentration (% massique) dans différentes bandes axiales d'un cylindre rotatif à 15 rpm.	100
6.1. Paramètres pour le modèle utilisé.	108
6.2. Débits obtenus pour chaque silo et trémie.	116
6.3. Débits obtenus pour chaque trémie dans les cas (A) et (B).	123
8.1. Paramètres utilisés pour la méthode DEM-MPM	156
9.1. Valeurs propres maximales de \mathbf{P}	180

Table des figures

2.1. Application originale de la RPT pour l'étude des réacteurs polyphasiques. La méthode permet de visualiser le champ de vitesse dans différents systèmes opaques.	13
2.2. Illustration du mélangeur en V utilisé dans ce travail. Selon la position angulaire du mélangeur, le rayon gamma peut interférer avec l'interface ou la frontière.	15
2.3. Dimensions du mélangeur en V étudié dans ce travail.	22
2.4. Effet de l'interface sur les comptes mesurés. La ligne pleine représente le signal mesuré et la ligne avec points représente la prédiction de notre modèle. Résultats obtenus pour différents niveaux de remplissage : a) 0% b) 40%.	23
2.5. Profil du nombre de comptes le long de la tranche A-A du mélangeur en V à partir du détecteur 1 montrant la forte anisotropie induite par l'interface : a) $\theta = 0$, b) $\theta = \pi/2$, c) $\theta = \pi$, d) $\theta = 3\pi/2$	26

2.6. Validation avec un traceur fixe dans un mélangeur en V vide à 20 rpm. La ligne en tirets représente la position réelle et la ligne pleine représente la position obtenue par RPT. (a)-(b) : La position (cm) et la vitesse (cm/s) dans le mélangeur vide. (c)-(d) : La position (cm) et la vitesse (cm/s) avec un niveau de remplissage de 40% (v/v).	27
2.7. Profil de sensibilité $S_T(\%/cm^{-1})$ le long de la coupe A-A du mélangeur en V : a) $\theta = 0$, b) $\theta = \pi/2$, c) $\theta = \pi$, d) $\theta = 3\pi/2$	29
2.8. Signal typique obtenu montrant les coordonnées x , y , et z durant 4096 points de mesure avec une période d'échantillonnage de 7 ms.	29
2.9. Champs de vitesses moyennes typiques obtenus après reconstruction des trajectoires. (a)-(b) : Position angulaire $\theta \in [0^\circ, 5^\circ]$ (cm/s). (c)-(d) : Position angulaire $\theta \in [177.5^\circ, 182.5^\circ]$ (cm/s).	30
3.1. Différents types d'attracteurs.	39
3.2. Deux particules initialement infiniment voisines suivront deux évolutions distinctes selon le niveau de chaos présent dans le système. Le taux de séparation exponentiel des trajectoires est donné par l'exposant de Lyapunov.	43
3.3. Différentes sections de Poincaré pour géométries avec différentes excentricités. Tiré de Khakhar <i>et al.</i> 1999.	46
3.4. Exemple de deux attracteurs faisant l'objet de la validation. (a) Une projection dans le plan $x - y$ de l'attracteur de Lorentz. (b) Une projection dans le plan $x - z$ de l'attracteur de Rössler.	48
3.5. Fonction de corrélation en fonction de la dimension ϵ . (a) Les résultats obtenus pour l'attracteur de Lorentz et (b) les résultats pour l'attracteur de Rössler. La tendance log-linéaire est clairement observée.	49

3.6. Courbe de $L_k(k)$ en fonction de k . La pente de la droite est la valeur de l'indice de Lyapunov maximal λ_1 . (a) Pour l'attracteur de Henon, (b) pour l'attracteur de Lorentz.	50
3.7. (a) Entropie de Kolmogorov calculée à différentes valeurs de d . (b) Valeur de la fonction de corrélation pour différentes valeurs de d	52
3.8. Clichés microscopiques (SEM) des particules sphéronisées lactose-avicel utilisées dans le cylindre. a) 50X, b) 500X, c) Distribution granulométrique des particules utilisées.	53
3.9. Fonction de corrélation pour différentes valeurs de ϵ montrant un comportement log-linéaire pour différentes valeurs de m dans a) le mélangeur en V et b) le cylindre.	54
3.10. Évolution de L_k pour des valeurs croissantes de k avec deux valeurs de m pour a) le mélangeur en V et b) le cylindre. L'indice de Lyapunov est donné par la pente de la partie linéaire de la courbe.	55
4.1. Les particules se retrouvent mélangées par rapport à la couleur mais s'organisent en fonction de leur taille (mélange au sens restreint. Chaque classe de particules se déplace dans des zones précises en fonction de leur taille.	66
4.2. Évolution de la mesure de mélange β dans le mélangeur en V et dans le mélangeur cylindrique.	73
4.3. Composantes axiales et radiales de la corrélation dans a) le mélangeur en V et b) le mélangeur cylindrique.	73
4.4. Deux méthodes pour la construction de particules virtuelles à partir d'une seule trajectoire de particule. a) La méthode du volume de contrôle, b) Méthode des trajectoires à longueur constante.	75

4.5. Effet du nombre de particules considérées pour le calcul de la courbe de mélange radial.	76
4.6. Évolution du mélange au sens restreint β_{ws} et au sens large β_{ss}	78
4.7. (a)-(b) : Profils axial et radial de la fonction couleur indépendante de la taille qui permet de représenter le mélange au sens faible. (c)-(d) Fonction couleur identifiant la taille des particules qui révèle une claire corrélation entre la répartition des particules et leur taille.	78
4.8. Sections de Poincaré dans le mélangeur Kenics. (a) Distribution initiale, (b) N=2, (c) N=4, (d) N=6. (<i>Données gracieusement rendues disponibles par Dr. M. Heniche et Pr. P.A. Tanguy</i>)	79
4.9. Évolution du mélange au sens restreint β_{ws} en fonction du nombre d'éléments traversés dans le mélangeur Kenics.	80
5.1. Les matériaux de tailles différentes se séparent sous l'action de la rotation dans un mélangeur cylindrique. La ségrégation axiale apparaît dès les premières rotations, mais les patron définitifs (tels que ceux présentés ici) apparaissent après environ 100 rotations. Les particules jaunes, blanches et bleues ont des diamètres respectifs de 200, 500 et 700 microns environ.	83
5.2. Mesures RPT d'un cylindre en rotation à 20 RPM. (a) Champ de vitesse. (b) Champ d'occurrence.	85
5.3. Schéma représentant le calcul de la radiation mesurée par chacun des détecteurs. Dans un premier temps, l'efficacité ξ_{ij} entre une bande i et un détecteur j est calculée. La radiation totale (ou le rapport de radiation) mesurée par le détecteur j est alors la somme de toutes les contributions provenant de chacune des bandes i	90

5.4. Évolution de ψ en fonction de la concentration massique de traceurs radiomarqués dans un échantillon standard.	92
5.5. Distribution de tailles de particules pour les particules de 200 et 750 microns avant (bulk part.) et après (rad. tracer) irradiation.	93
5.6. Images SEM des particules de (a)-(b) 200 microns et (c)-(d) 750 microns. On y aperçoit les cristaux de NaCl à la surfaces des particules.	94
5.7. Montage typique pour la BRPT.	95
5.8. Évolution du signal dans un mélangeur cylindrique à 15RPM dans la direction radiale pour (a) les particules de 750 microns, (b) les particules de 200 microns.	97
5.9. Profils de concentration dans un cylindre rotatif. Les mesures ont été prises en triplicata et sont présentées sur le graphique pour chacune des tailles de particules étudiées. La taille des échantillons est de 100.00 g. .	101
6.1. Silo et trémies étudiés dans ce chapitre. De gauche à droite : le silo, les trémies (30, 45 et 60 degrés d'ouverture).	107
6.2. Silo $\theta = 0^\circ$. (a)-(b) Vitesses dans les sections à $H/d = 9$ et $H/d = 29$ et courbes d'isovitesse verticale pour $W = 16$ mm. (c)-(d) $W = 24$ mm. . . .	110
6.3. Trémie $\theta = 30^\circ$. (a)-(b) Vitesses dans les sections à $H/d = 9$ et $H/d = 29$ et courbes d'isovitesse verticale pour $W = 18$ mm. (c)-(d) $W = 24$ mm. .	111
6.4. Trémie $\theta = 45^\circ$. (a)-(b) Vitesses dans les sections à $H/d = 9$ et $H/d = 29$ et courbes d'isovitesse verticale pour $W = 18$ mm. (c)-(d) $W = 24$ mm. .	112
6.5. Trémie $\theta = 60^\circ$. (a)-(b) Vitesses dans les sections à $H/d = 9$ et $H/d = 29$ et courbes d'isovitesse verticale pour $W = 18$ mm. (c)-(d) $W = 24$ mm. .	113
6.6. (a) Débit massique à la sortie du silo ($\theta = 0$) en fonction de l'ouverture de la fente W . (b) ν^* en fonction de l'angle de la trémie.	114

6.7. Profil de vitesses moyennes (composante verticale) dans une section trans- versale ($x/d=0$) dans la trémie $\theta = 60^\circ$ et $W=24\text{mm}$	114
6.8. (a)-(c) Évolution de la vidange du silo $\theta = 0^\circ$ et $W=24\text{ mm}$. (a) $t=1.68\text{ s}$, (b) $t=3.35\text{ s}$, (c) $t=5.01\text{ s}$, (d)-(f) Vidange de la trémie $\theta = 60^\circ$ et $W=24\text{ mm}$: (d) $t=1.68\text{ s}$ (e) $t=3.35\text{ s}$, (f) $t=5.01\text{ s}$	115
6.9. Comparaison avec les résultats de Rycroft et al. (2006)	117
6.10. Vidange du silo. Comparaison avec les résultats de Rycroft et al. (2006). Puisque les vitesses sont plus faibles dans notre cas, les bandes se dé- placent plus lentement.	118
6.11. Silo $\theta = 0^\circ$ pour les cas (A) et (B). (a) Vitesses dans les sections à $H/d = 9$ et $H/d = 29$. (b) Courbes d'isovitesse verticale pour $W = 16\text{ mm}$ (cas A). .	121
6.12. Trémie $\theta = 30^\circ$ pour les cas (A) et (B). (a) Vitesses dans les sections à H/d $= 9$ et $H/d = 29$. (b) Courbes d'isovitesse verticale pour $W = 18\text{ mm}$ (cas A).	121
6.13. Trémie $\theta = 45^\circ$ pour les cas (A) et (B). (a) Vitesses dans les sections à H/d $= 9$ et $H/d = 29$. (b) Courbes d'isovitesse verticale pour $W = 18\text{ mm}$ (cas A).	122
6.14. Trémie $\theta = 60^\circ$ pour les cas (A) et (B). (a) Vitesses dans les sections à H/d $= 9$ et $H/d = 29$. (b) Courbes d'isovitesse verticale pour $W = 18\text{ mm}$ (cas A).	122
7.1. Vitesse descendante moyenne $v^*(y)$ en fonction de la hauteur du silo y/d pour différentes valeurs de pas de temps.	129
7.2. Haut : effet du pas de temps h sur le profil de vitesse moyenne descen- dante à différentes hauteurs dans le silo : (a) $y/d=9$; (b) $y/d=29$. Bas : Effet sur les profils de fluctuations de vitesse (c) $y/d=9$, (d) $y/d=29$	130

7.3. Effet du pas de temps h sur le champ de vitesse (d/s) : (a) $h = 5.0 \times 10^{-5}$ s, (b) $h = 1.0 \times 10^{-5}$ s, (c) $h = 2.0 \times 10^{-6}$ s, (d) $h = 1.0 \times 10^{-6}$ s	134
7.4. Effet du pas de temps h sur les propriétés de mélange : (a) Fonction de corrélation radiale, (b) Fonction de corrélation axiale.	135
7.5. (a) Évolution ϵ_x en fonction de h^2 . (b) Évolution de ϵ_v en fonction de h . En légende, valeurs de k_n utilisées.	142
7.6. (a) Pente de l'erreur de ϵ_x en fonction de k_n . (b) Pente de ϵ_v en fonction de $\sqrt{k_n}$	143
7.7. (a) Évolution ϵ_x en fonction de h . (b) Évolution de ϵ_v en fonction de h . En légende, valeurs de k_n utilisées.	144
8.1. Décomposition type pour l'espace d'état S	151
8.2. (a) Distribution initiale de particules dans le système de mélange. (b) Champs de vitesses moyennes et lignes de courant en régime permanent (la légende présente la norme de la vitesse moyenne dans le plan radial (m/s)).	152
8.3. Comparaison des courbes de RSD obtenues avec la DEM et celles obtenues avec DEM-MPM avec $N=1813$, $N_{LT} = 2$ et différentes valeurs de τ	158
8.4. Distribution de particules dans une section centrale du cylindre après $t = 2, 6, 10, 14$ s, respectivement, pour $N = 1813$ et $N_{LT} = 2$. Figures 8.4(a)-8.4(d), $\tau = 2$ s ; figures 8.4(e)-8.4(h), $\tau = 4$ s ; figures 8.4(i)-8.4(l), résultats DEM.	159

8.5. Distribution des particules dans une section transversale du cylindre après $t = 2, 6, 10, 14$ s. Figures 8.5(a)-8.5(d), 8.5(e)-8.5(h), 8.5(i)-8.5(l), 8.5(m) et 8.5(p) sont obtenues avec DEM-MPM ($\tau = 4$ s, $N_{LT} = 2$) et $N = 253, 1813, 3587$ et 5595 cellules, respectivement. Les figures 8.5(q)-8.5(t) sont obtenues avec la DEM.	160
8.6. Effet du nombre d'états N sur la précision de la DEM-MPM.	161
8.7. Graphe de ϵ en fonction de N_{LT} pour $N = 5595, 3587$ et 1813 , et $\tau = 4$ s. . .	162
8.8. Effet de N_{LT} sur les courbes de RSD avec $\tau = 4$ s et $N = 1813$	163
8.9. Distribution de la fonction couleur sur une section transversale d'un mélangeur cylindrique après $t = 6$ s avec $N = 3587$, $\tau = 4$ s. Figure 8.9(a), $N_{LT} = 1$; figure 8.9(b), $N_{LT} = 12$; figure 8.9(c), résultats DEM.	164
9.1. Spectre des valeurs propres dans le plan complexe obtenu pour la matrice présentée par Chen et Fan (1972).	176
9.2. Évolution de la distribution de probabilité en fonction du nombre d'itérations et distribution invariante π obtenue par le premier vecteur propre gauche de \mathbf{P}	178
9.3. Évolution de la distance entre la distribution de probabilités μ_k et π . La figure présente aussi la borne supérieure calculée.	179
9.4. Distribution invariante obtenue dans le cylindre.	181

Liste des sigles et abbréviations

$(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$	Base orthonormale cartésienne
α	Constante de l'équation de Beverloo
α_{max}	Angle maximal sous-tendu par un cylindre
$\bar{\mathbf{g}}$	Vecteur unitaire le long de la gravité
$\bar{\mathbf{v}}$	Vitesse moyenne
\bar{C}	Moyenne de la concentration
β	Constante du modèle élastique
β_{max}	Angle maximum sous-tendus le long du de l'axe
β_{min}	Angle minimum sous-tendus le long de l'axe
β_{ss}	Mesure de mélange au sens large
β_{ws}	Mesure de mélange au sens restreint
α	Direction de corrélation maximale
δ_i	Vecteur unitaire provenant de \mathbf{x} et pointant vers \mathbf{P}_i
δ_n	Vecteur de déformation normal
δ_{pq}	Déformation du contact entre les particules p et q

δ_t	Vecteur de déformation tangentielle
λ	Vecteur de direction aléatoire
ω_i	Vecteur de vitesse angulaire de la particule i
π	Distribution invariante de la chaîne de Markov
\check{x}	Variable adimensionnelle
$\chi = \{\chi_i\}_{i=1\dots N}$	Nombres aléatoires
$\Delta\sigma_n^2$	Dispersion radiale entre t_n et t_{n+1}
$\delta\mathbf{x}_0$	Perturbation des conditions initiales
$\delta_{t,max}$	Déformation maximale tangentielle
δ_{pq}	Vitesse de déformation du contact entre les particules p et q
$\ell(t)$	Distance parcourue dans la phase solide
ϵ_x	Erreur sur la position
Γ	Espace de phase
Γ	Surface de Poincaré
γ_t	Coefficient du modèle
\mathfrak{S}	Moment de frottement de roulement
$\Lambda^t(i)$	Composante principale de $\mathbf{X}^t(i)$
λ_*	Deuxième valeur propre maximale de la matrice de transition
λ_i	Indices de Lyapunov
λ_i	Valeurs propres de \mathbf{M}

\mathbb{W}	Matrice de transition topologique
\mathbf{b}	Base de vecteurs qui supporte le triangle T_n
\mathbf{F}_n^{ij}	Force normale totale entre les particules i et j
\mathbf{f}_{pq}^t	Composante tangentielle au contact entre les particules p et q
\mathbf{F}_t^{ij}	Force tangentielle totale entre les particules i et j
\mathbf{G}_α^t	Vecteur de corrélation le long de α au temps t
$\mathbf{M}(t)$	Matrice jacobienne de la transformation associée à $\phi(x, t)$.
$\mathbf{M} = \mathbf{C}\mathbf{C}^T$	Matrice de covariance
\mathbf{n}_{ij}	Vecteur unitaire pointant du centre de la particule i vers le point de contact avec la particule j
\mathbf{n}_{pq}	Vecteur normal unitaire entre p et q
\mathbf{n}_{pq}^\perp	Vecteur unitaire dans le plan normal à \mathbf{n}_{pq}
\mathbf{P}	Matrice de transition
\mathbf{P}	Point d'intersection
\mathbf{P}_{ij}	Entrées de la matrice de transition \mathbf{P}
\mathbf{P}_i	Points d'un maillage régulier de la surface ∂V
\mathbf{r}	Vecteur pointant du centre de la particule i vers le point de contact avec la particule j
$\mathbf{T}^*(x, y)$	Température granulaire
\mathbf{u}	Vecteur propre gauche de la matrice de transition \mathbf{P}

\mathbf{v}	Vecteur propre droite de la matrice de transition
\mathbf{v}'	Fluctuation de la vitesse
\mathbf{v}_n	Composante normale de la vitesse
\mathbf{v}_t	Composante tangentielle de la vitesse
\mathbf{W}	Matrice de transition normalisée
\mathbf{w}_i	Vecteur propres unitaires de \mathbf{M}
$\mathbf{x}(x, y, z)$	Coordonnées cartésiennes du traceur
$\mathbf{X} = \{X_1, X_2, \dots, X_M\}$	Vecteur plongé
\mathbf{X}^t	Matrice des positions normalisées des traceurs au temps t
\mathbf{x}^t	Vecteur des positions des particules au temps t
$\mathbf{x}^t(j)$	Position de la particule j au temps t
$\mathbf{x}_0(j)$	Position initiale de la particule j
\mathcal{B}	Espaces mesurables
\mathcal{P}	Mesure de probabilité sur un espace mesurable
$\mathcal{U} = \{u_1, u_2, \dots, u_n\}$	Ensemble des propriétés des particules
\mathcal{W}	Ensemble des vecteurs propres unitaires de \mathbf{M}
μ	Coefficient de friction statique
μ	Mesure invariante sur un espace mesurable
μ_d	Coefficient d'atténuation dans le détecteur
μ_n	Distribution de probabilités à la n -ième itération

$\mu_{p,p}$	Coefficient de frottement dynamique particules-particules
μ_r	Coefficient de frottement de roulement
μ_s	Coefficient d'atténuation dans le solide
$\mu_{w,p}$	Coefficient de frottement dynamique particules-parois
ν	Dimension de corrélation
ν	Nombre de Poisson
ν	Photons par désintégration
Ω	Angle solide
Ω	Espace compact
ω	Vitesse angulaire du mélangeur
$\omega = \{\omega_i\}_{i=1\dots N}$	Nombres aléatoires
ϕ	Fraction de vide dans l'assemblage de particules
ϕ	Photopeak-to-total ratio
$\phi(x, t)$	Écoulement sur un espace
$\Phi = \{\Phi_i\}_{i=1\dots N}$	Ensemble des rayonnements sur les N détecteurs
Φ_j^m	Mesure de radiation par le détecteur j
Φ_i	Radiation du modèle pour le détecteur i
$\phi_p(i, t)$	Fonction indicatrice : retourne 1 si la particule est dans p au temps t , 0 sinon
π_0	Plan qui intersecte le rayon
$\psi(z, t)$	Rapport de radiation

- $\psi_{ij}(t)$ Contribution relative de la section i à la mesure du détecteur j
- $\rho(X, Y)$ Coefficient de corrélation entre X et Y
- $\rho_d(\mathbf{r}, t)$ Fonction d'interaction avec le détecteur
- $\rho_s(\mathbf{r}, t)$ Fonction d'interaction avec la phase solide
- $\sigma(t)$ Distance parcourue dans le détecteur
- σ_n^2 Variance du temps de séjour moyen au pic n
- σ_X Écart-type de la variable X
- τ Taux de décroissance de la source
- τ Temps mort du détecteur
- τ_n Temps de séjour moyen au pic n
- θ Angle d'ouverture des trémies
- θ Position angulaire du mélangeur
- $\varphi(i, t)$ Nombre total de particules dans l'état i au temps t
- \wp Application de Poincaré
- ξ_i Vecteurs invariant de la matrice de transition modifiée \mathbf{W}
- $\xi_i(\mathbf{x}, t)$ Efficacité du détecteur i en \mathbf{x}
- $\{x_1, x_2, \dots, x_m\}$ Série de données représentant la position d'une particule
- $\{z_1, z_2, \dots, z_n\}$ Ensemble d'intersection de trajectoires avec une surface transversale
- A Aire
- A Groupe adimensionnel

A	Sous ensemble de R .
a	Amplitude du mouvement périodique du plan
$a(t)$	Accélération au temps t
B	Groupe adimensionnel
B	Sous-ensemble de R .
C	Groupe adimensionnel
$C(\epsilon)$	Fonction de corrélation dans un voisinage ϵ .
$C(d, \epsilon)$	Fonction de corrélation augmentée
$C(p)$	Fonction indicatrice de couleurs de la particule p
$C = C(z, t)$	Concentration en traceurs radioactifs
$C_n(f, g)$	Corrélation entre f et g
C_p	Concentration dans l'échantillon p
D	Dimension de Hausdorff
d	Diamètre des particules
$d\mathbf{A}$	Vecteur normal à la surface du détecteur
d_{50}	Diamètre médian de particules
D_z	Coefficient de diffusion axial
e	Coefficient de restitution
$E(t)$	Signal normalisé
$E[X]$	Espérance de la variable X

E^*	Module de Young équivalent
E_i	Module de Young de la particule i
f_i	Forces aux points de contacts i
f_w	Nombre de points dans W .
g	Accélération gravitationnelle
g	Opérateur
h	Pas de temps d'intégration
$H(x)$	Fonction de Heaviside
h_{KS}	Entropie de Kolmogorov-Sinai
h_{top}	Entropie topologique
I	Intensité de ségrégation
I_i	Moment d'inertie de la particule i
J	Période de plongement
K	Nombre de propriétés dans \mathcal{U}
k	Incrémenteur
K_1	Entropie métrique
k_n	Coefficient d'élasticité normal
k_n	Constante d'élasticité
k_t	Coefficient d'élasticité tangentiel
L	Lagrangien augmenté

L	Largeur du silo
l	Incrémenteur
L_k	Logarithme de la distance entre deux points
M	Nombres d'entrées dans le vecteur plongé
M	Nombres de points pour la discrétisation BRPT
m	Dimension de la série de donnée
m	Nombre de particules dans chaque état
m_i	Masse de la particule i
N	Nombre d'échantillons
N	Nombres de trajectoires générées
N_{LT}	Nombres d'itérations pour l'apprentissage
N_p	Nombre total de particules dans le système
N_{tf}	Nombre d'itérations de la chaîne de Markov pour compléter la simulation
Q	Débit de vidange du silo/trémie
$Q(t)$	Signal mesuré au temps t
R	Activité de la source
R	Espace dans \mathbb{R}^3
r	Vecteur pointant en direction du détecteur
$R(x)$	Résolution de la méthode en x
$R(z, t)$	Radiation totale émanant d'une bande infinitésimale en z au temps t

R^*	Rayon équivalent
$R_1(h)$	Résidu d'ordre 1 par rapport à h
$R_2(h)$	Résidu d'ordre 2 par rapport à h
r_{ij}	Distance entre les points X_i et X_j .
R_i	Rayon de la particule i
S	Espace d'état
S	Sensibilité d'une fonction
S	Sous-région continue de V
S	Transformation préservant la mesure qui caractérise le mélange dans R .
S_i	Sections transversales de l'espace
Sa	Nombre de Savage
T	Période d'observation
T	Période d'échantillonnage
T	Transformation préservant la mesure
t	Temps total d'observation
t	Temps
T_n	Triangle supporté par trois noeuds
t_n	Temps correspondant à la n -ième valeur minimale du signal
t_n	Temps réel du processus de Markov
U	Ensemble des particules q ayant un contact avec les particules p

U	Voisinage dans un espace
$u_k(q)$	k -ième propriété de la particule q
V	Espace compact dans \mathbb{R}^3
$v(x, y)$	Profil de vitesse verticale dans le silo/trémie
$v^*(y)$	Vitesse moyenne en y
v_0	Vitesse caractéristique du système
v_z	Vitesse axiale
W	Ouverture de la fente du silo/trémie
W	Sous-région de R .
X	Ensemble de variables mesurables
$X_l^t(i)$	Composante l normalisée de la particule i au temps t
x_0	Conditions initiales des positions
$X_i = \{x_i, x_{i+j}, \dots, x_{i+(m-1)j}\}$	Vecteurs dans la dimension de plongement
y_0	Coordonnée d'un point du plan virtuel
z	Position axiale
DEM	Discrete Element Method
DEM-MPM	Discrete element method with Markov Process Method
Fr	Nombre de Froude
HSLV	Half Step Leapfrog Verlet
PEPT	Positron Emission Particle Tracking

PIV Particle Image Velocimetry

RPT Radioactive Particle Tracking

RSD Relative Standard Deviation

RSD_r Random Mixed State Relative Standard Deviation

Chapitre 1

Introduction

1.1 Contexte

Les matériaux granulaires sont présents dans plusieurs sphères de notre environnement et dans une multitude de procédés industriels. D'un point de vue physique, ces matériaux présentent une complexité étonnante du fait qu'ils sont composés de plusieurs composantes et que l'ensemble de ces constituants confèrent au matériau ses propriétés spécifiques. D'un point de vue théorique, les fluides étant des matériaux continus, il est possible de capturer la physique des écoulements par la résolution des équations de Navier-Stokes combinés à une équation de continuité et un modèle rhéologique. Il en est toutefois autrement pour les écoulements particuliers denses pour lesquels il n'existe pas d'équations du type Navier-Stokes, bien que certaines formes modifiées de cette équation, basées sur les théories cinétiques, puissent être appliquées dans le cas d'écoulements à faible concentration en particules (Savage et Jeffrey, 1981; Jenkins et Savage, 1983; Lun et al., 1984; Duffy, 2000).

De plus, les écoulements particuliers denses présentent des caractéristiques spé-

cifiques à certains états de la matière :

Solide : Tout comme les solides, les particules ont des propriétés de dureté, d'élasticité et ont un coefficient de frottement spécifique. De plus, lorsqu'on applique une force sur un assemblage de particules, il y a création d'un réseau de contraintes à l'intérieur de l'assemblage. Ces forces s'alignent, comme dans des solides, le long de chaînes caractéristiques.

Liquide : Comme les fluides, les matériaux granulaires peuvent s'écouler. Néanmoins, contrairement à ceux-ci, la tête hydrostatique dans un silo atteint une valeur qui, au-delà d'une certaine hauteur, devient indépendante de la hauteur totale de solide dans le silo. C'est pour cette raison, par exemple, que le sable est utilisé dans un sablier pour marquer le temps.

Gaz : Tout comme les gaz, les matériaux granulaires peuvent être comprimés. Toutefois, contrairement aux gaz, les collisions sont inélastiques et font apparaître des phénomènes d'agglomération dus aux pertes d'énergie du système. Ainsi, l'état stable d'un tel arrangement de particule tend à former un agglomérat de particules immobiles, ce qui est bien différent de l'état d'un gaz parfait. Ceci provient du fait que la température affecte le mouvement des atomes d'un gaz, mais n'a aucun impact sur le mouvement d'une particule, trop grosse pour que cette force thermique, appelée le mouvement Brownien, ait un effet significatif sur son mouvement.

1.2 Motivation de la thèse

1.2.1 Mesure et validation

Par cette complexité, il en résulte que les matériaux granulaires sont difficiles à caractériser, à mesurer et à décrire. Difficiles à caractériser puisque les propriétés d'une seule particule ne peut servir à caractériser l'ensemble des particules et, par extension, le comportement de celui-ci. Ainsi, pour représenter un ensemble de particules, on recourt donc généralement à des distributions de propriétés (e.g. tailles, densité, sphéricité) ainsi qu'à des méthodes de mesures de propriétés basés sur le comportement d'un ensemble de particules. C'est pourquoi d'ailleurs, une des difficultés spécifiques liée à la caractérisation des matériaux granulaires touche la préparation des échantillons. Il y a donc une attention particulière à donner aux échantillons avant de prendre la mesure afin de s'assurer de la reproductibilité de celle-ci. Il y a également des questions à poser quant à la signification physique des propriétés mesurées ainsi qu'au lien existant entre les propriétés de l'ensemble des particules (échantillon) et les propriétés des particules prises individuellement.

Ensuite, ce sont des matériaux difficiles à mesurer, entre autre, en raison de leur opacité. En effet, il est difficile, par exemple, de mesurer les champs de vitesse de ces matériaux en écoulements avec des techniques traditionnelles visuelles développées et appliquées pour les écoulements de fluides translucides. Finalement, ces matériaux sont difficiles à décrire puisqu'il s'agit d'un ensemble discret. Pour avoir une description du comportement de l'ensemble des particules, le modèle doit être intégrer tous les éléments présents (i.e. toutes les particules). Il en résulte donc que la complexité du modèle mathématique de même que sa résolution augmente avec le nombre de particules.

Plusieurs difficultés proviennent de cette description locale. Par exemple, ces modèles utilisent le coefficient de friction entre les particules comme paramètre d'entrée. Toutefois, le frottement interparticulaire est généralement caractérisé à l'aide de cellules de frottement. Plusieurs doutes quant à la validité de cette méthode de caractérisation du coefficient de frottement commencent à émerger après que les modèles eurent montré que cette approche surestime généralement le véritable coefficient de frottement. La difficulté ici vient à faire le lien entre une description locale d'un phénomène et une mesure globale de l'effet de ce paramètre : développer des méthodes de caractérisation des paramètres basées sur des tests qui présentent une sensibilité significative des paramètres sur la mesure choisie. Certes, le coefficient de frottement a un impact sur les résultats obtenus en cellules de frottement d'une manière relative. Il est toutefois difficile d'en extraire la véritable valeur de ce coefficient.

Le groupe de recherche dans lequel ce projet s'intègre a développé des modèles discrets pour la simulation des écoulements granulaires de même que des outils de mesure expérimentaux pour les écoulements granulaires. Néanmoins, les modèles sont complexes et n'ont fait l'objet d'aucune investigation sérieuse quant à la validité des résultats. Cette problématique n'est pas unique au groupe d'ici, mais à tous les groupes travaillant sur ces modèles. La difficulté première provient de la difficulté liée à la mesure des systèmes expérimentaux avec les méthodes classiques.

1.2.2 Le mélange

Généralement, sauf pour les matières premières, les matériaux granulaires sont rarement commercialisés à l'état purs. En effet, il existe généralement plus d'un constituant dans les produits granulaires solides. Par exemple, une formulation pharmaceutique peut contenir plusieurs composants granulaires dont, un agent actif, une

matrice de remplissage, un colorant, des saveurs, des désintégrants, des liants, des surfactants. Il y a donc plusieurs ingrédients qui doivent être mélangés de manière à ce que chacun des comprimés aient le dosage requis par la formulation.

Néanmoins, cette étape de mélange est parfois difficile en raison du phénomène de ségrégation. Ainsi, il n'est pas rare de rencontrer des formulations dans lesquelles des ingrédients de granulométrie ou de densité différente se séparent complètement du mélange durant, par exemple, le transport entre le mélangeur et la presse. Il est donc fondamental de pouvoir quantifier la tendance des matériaux granulaires à se séparer, de comprendre dans quelles conditions ces matériaux sont plus sensibles à la ségrégation et, comme objectif final, contrôler cette ségrégation par le *design* du mélangeur et la mise au point des formulations. Pour atteindre ces objectifs, il est crucial d'avoir des outils de caractérisation de même que des outils théoriques et de modélisation pour tenter de cibler certains paramètres importants.

Tel que rapporté récemment, l'étude des écoulements granulaires tri-dimensionnels est un domaine en émergence, en lien avec le développement de techniques non-intrusives pour l'observation des structures et des propriétés de ces écoulements (Sundaresan et al., 2003; Ottino et Khakhar, 2001). Ceci se fait en lien avec le développements des modèles permettant de simuler les écoulements granulaires. En effet, la nature opaque des matériaux granulaires requiert le développement de nouveaux outils, les techniques utilisées pour l'étude des fluides semi-transparentes n'étant aucunement applicables dans ce cas-ci. Il est donc difficile de comparer des données expérimentales sur les écoulements granulaires avec des données numériques. La validation des simulations de mélange granulaire est donc un sujet peu abordé pour des raisons techniques.

Néanmoins, les techniques non-intrusives radioactives (RPT) ont montré leur po-

tentiel extraordinaire dans l'étude des écoulements polyphasiques en lits fluidisés (Roy et al., 1994; Cassanello et al., 1995; Larachi et al., 1996; Kiared et al., 1997; Larachi et al., 1995a; Cassanello et al., 1996, 1999; Limtrakul et al., 2005). Récemment, une technique basée sur une méthode de suivi de particules radioactives par émission de positron (PEPT) a été appliquée avec succès sur certains mélangeurs modèles (Kuo et al., 2005; Forrest et al., 2003; Hiseman et al., 2002; Laurent et Bridgwater, 2000) et certaines mesures effectuées par RPT dans un cylindre rotatif (Sherritt et al., 2003).

1.3 Objectif principal de la thèse

L'objectif de la thèse est en lien avec la nécessité de *voir pour comprendre* l'opération de mélange impliquant des matériaux granulaires. L'objectif principal de ce travail vise à développer une approche pour valider les résultats de simulations lagrangiennes. À cet objectif se greffe une série d'objectifs spécifiques :

1. Développer des techniques de caractérisation expérimentale des écoulements et du mélange en milieux granulaires denses ;
2. Dériver des outils de mesure du mélange et du chaos à partir de données expérimentales et numériques ;
3. Quantifier la précision numérique de la méthode des éléments discrets (DEM) ;
4. Établir des approches de modélisation du mélange de matériaux granulaires moins coûteux en calcul.

1.4 Structure de la thèse

La thèse présentée vise à répondre à certaines questions ouvertes couvrant trois secteurs du mélange des matériaux granulaires.

1.4.1 Développement de méthodes expérimentales

Il existe peu de techniques actuellement disponibles pour suivre le mélange en ligne, de manière non-intrusive, de matériaux granulaires. Les techniques de PEPT sont coûteuses et ne s'appliquent que dans le cas de mélangeurs à faibles volumes (i.e. moins de 0.5L). D'autre part, les techniques de RPT sont inapplicables à des géométries autres que cylindriques et verticales (e.g. lits fluidisés cylindriques). Cette thèse présente deux techniques expérimentales nouvelles pour l'étude du mélange en continu, notamment en généralisant la méthode actuelle de la RPT et en développant une méthode macroscopique (BRPT).

1.4.2 Développement d'une mesure de mélange

La littérature des cinquantes dernières années étudie le mélange des poudres principalement par l'entremise de techniques intrusives ayant pour base commune l'échantillonnage. Ainsi, des indices de mélange ont été développés suivant ces techniques expérimentales (dont notamment l'indice de ségrégation) et basés sur la variance de la concentration dans N échantillons prélevés. Ces techniques ont le défaut d'être fonction de N (plus N est élevé, plus la mesure est bonne), et d'être basées sur la concentration. Toutefois, l'évolution de la concentration dépend de la condition initiale du système (profil axial ou radial initial de concentration) et donc mène à des conclusions difficilement généralisables quant aux temps de mélange. Par exemple, dans un

mélangeur cylindrique, si la poudre est disposée avec un profil radial de concentration initial, le temps de mélange est court bien que le système se mélange très peu axialement. Ceci est sans compter l'effet de l'échantillonnage lui-même et on ne compte plus le nombre de publications qui discutent de cet effet sans, malheureusement, proposer d'alternatives robustes. De plus, elle ne donne aucune information quant aux directions principales de mélange. Cette thèse emprunte des outils d'analyse du mélange basés sur la théorie du chaos largement utilisée en mélange de fluides. Pour compléter, une toute nouvelle mesure invariante du mélange est développée et deux nouvelles définitions sont introduites, qui donnent, du coup, les directions principales de mélange et les bornes supérieures de courbes de mélange en utilisant une méthode non-intrusive.

1.4.3 Modélisation des écoulements granulaires

À l'heure actuelle, trois approches de modélisation existent, soient les modèles lagrangiens, les modèles eulériens et les modèles stochastiques. L'expertise du groupe de recherche étant basée sur les modèles discrets (DEM), nous allons centrer notre discussion sur les modèles lagrangiens. Il n'existe à l'heure actuelle aucune discussion quant à l'effet de l'erreur numérique des modèles lagrangiens sur la dynamique granulaire obtenue et, plus spécifiquement, sur les courbes de mélange. Cette thèse vise à répondre à certaines questions quant à l'erreur d'intégration, en permettant de trouver une relation entre cette erreur et les paramètres du modèle (par l'entremise d'une analyse dimensionnelle) et présente une discussion sur l'effet de certains paramètres sur les profils de vitesse et temps de vidange dans des trémies et silos.

Enfin, une nouvelle génération de modèles stochastiques, combinés à un modèle lagrangien, est développée. Cette génération de modèles est basée sur la théorie des

chaînes de Markov et une analyse exhaustive du mélange des particules est développée en lien avec les propriétés de l'opérateur construit.

Chapitre 2

Généralisation de la méthode de RPT aux systèmes complexes

2.1 Contexte

[†] L'utilisation de méthodes vélocimétriques nucléaires pour étudier le mélange granulaire dans les mélangeurs industriels est relativement nouveau et la majorité des travaux ont été effectués à l'aide de la méthode à émission de positron (PEPT), suivant les travaux originaux de Field et al. (1991). Durant la dernière décennie, les études utilisant la PEPT ont été nombreuses et ont touché à toute une variété de mélangeurs dont le ploughshare (Broadbent et al., 1993; Jones et Bridgwater, 1998; Forrest et al., 2003), le planétaire (Hiseman et al., 2002), le mélangeur à pale simple (Laurent et Bridgwater, 2000) et le mélangeur à cisaillement (Kuo et al., 2004). Des travaux récents

[†] Ce chapitre a été, en majeure partie, publié dans J. Doucet, F. Bertrand and J. Chaouki, *An extended radioactive particle tracking method for systems with irregular moving boundaries*, Powder Technology, Volume 181, No. 2, 6 Février 2008, Pages 195-204 (doi :10.1016/j.powtec.2006.12.019)

ont appliqué avec succès cette technique afin d'obtenir le champ de vitesse dans un mélangeur en V ayant différents niveaux de remplissage (Kuo et al., 2005).

Le mode de fonctionnement de la RPT est relativement simple. Le système de détection consiste en un réseau de 8 à 16 détecteurs à l'iodure de sodium dopé au thallium (NaI-Tl) qui dénombrent les désintégrations provenant d'une source avec un taux d'échantillonnage spécifique (typiquement 5 à 10 ms). Ce système a l'avantage principal d'être relativement abordable en terme de coûts en plus d'être compact en comparaison avec le système de PEPT qui utilise de coûteuses et imposantes caméras. Ainsi, il rend possible l'investigation de systèmes aux dimensions relativement importantes puisque les détecteurs peuvent être disposés individuellement autour de l'équipement. Ceci explique pourquoi la majorité de la littérature utilisant cette méthode est orientée vers l'étude de réacteurs polyphasiques (Cassanello et al., 1995; Larachi et al., 1996; Limtrakul et al., 2005).

Durant les dernières années, plusieurs travaux ont porté sur l'amélioration de la résolution et la sensibilité de la RPT soit en améliorant le plan d'expérience (Roy et al., 2002), soit en modifiant certains paramètres de l'expérience comme le choix de l'isotope pour le traceur (Godfroy et al., 1997; Roy et al., 2002). Jusqu'à maintenant, la reconstruction des trajectoires lagrangiennes d'un traceur avec les mesures obtenues par les détecteurs (faisant référence au problème d'inversion) a été effectuée exactement dans le cas de domaines à formes cylindriques, ce qui permet de considérer l'anisotropie géométrique induite par les frontières, référant ici aux travaux de Larachi et al. (1994, 1995b). La qualité de l'inversion dépend essentiellement de la précision avec laquelle cette anisotropie et l'angle solide avec chaque détecteur sont calculés. Dans le cas de géométries irrégulières, i.e. n'ayant pas une expression analytique pour représenter les frontières et soumises à une cinématique inconnue *a priori*, au-

cun travail n'a été fait quant à la résolution du problème inverse. Ceci limite de façon majeure l'étendue de l'applicabilité de cette approche originale à quelques familles de réacteurs chimiques et réservoirs. Dans le cas de mélangeurs de poudres, ceci constitue une limitation principale, tel qu'illustré par la seule étude utilisant la RPT sur un four cylindrique (Sherritt et al., 2003).

La majorité des mélangeurs utilisés dans l'industrie sont de facture complexe tel que, par exemple, le mélangeur en V et une variété de mélangeurs à retournement qui sont actuellement difficiles à étudier de façon expérimentale en utilisant la technique de RPT. De plus, ces systèmes présentent une cinématique complexe pour laquelle les techniques de reconstruction actuelles sont inadaptées. Une approche simpliste viserait à déplacer le réseau de détecteurs avec le mélangeur dans le référentiel lagrangien. Malheureusement, d'un point de vue mécanique, cette solution est difficile à réaliser et la sensibilité des détecteurs aux vibrations détériorerait assurément la qualité de la mesure et d'autant la qualité des trajectoires obtenues. À ce titre, il est question, dans ce chapitre, de développer une approche théorique permettant de généraliser la méthode à des systèmes à géométrie complexe soumis à un mouvement irrégulier.

2.2 Modèle théorique

L'algorithme de la RPT vise à trouver la position $\mathbf{x}(x, y, z)$ d'un traceur dans un ensemble compact $V \subset \mathbb{R}^3$ à l'aide de l'ensemble des mesures $\Phi = \{\Phi_i\}_{i=1..N}$ obtenues à partir de N détecteurs au temps t . La plus récente génération d'algorithme de reconstruction repose sur la résolution d'un problème de minimisation entre les événements mesurés et un modèle phénoménologique rigoureux proposé par Beam et al. (1978) et appliqué ensuite par Larachi et al. (1994). Ce modèle relie la position d'un émetteur

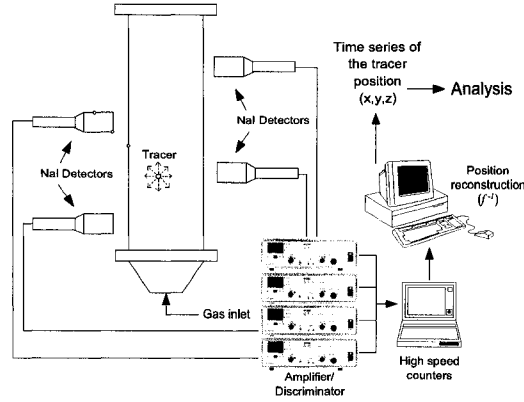


FIG. 2.1 – Application originale de la RPT pour l'étude des réacteurs polyphasiques. La méthode permet de visualiser le champ de vitesse dans différents systèmes opaques.

au nombre d'événements enregistrés par un détecteur cylindrique disposé n'importe où dans l'espace. Un schéma typique d'une expérience de RPT est présenté à la figure 2.1. Les détecteurs mesurent différents niveaux de radiation en fonction de leur position par rapport à la source. En utilisant un modèle approprié qui sera présenté en détail dans la section suivante, la position exacte du traceur peut être obtenue. La complexité de ce modèle a fait l'objet de nombreuses discussions, mais son évaluation est rendue relativement simple par l'utilisation d'une méthode de Monte-Carlo.

2.2.1 Le modèle phénoménologique

La position du traceur est représentée par les coordonnées cartésiennes $\mathbf{x}(x, y, z) \in V$ qui est une application $f^{-1} : \mathbb{R}^{N+1} \mapsto V$ tel que $f^{-1}(\Phi_1, \Phi_2 \dots \Phi_N, t) = \mathbf{x}(t)$. La fonction qui relie le nombre d'événements enregistrés par un détecteur i à la position du traceur dans le domaine est donnée par (Knoll, 2000) :

$$\Phi_i(\mathbf{x}, t) = \frac{T \nu R \phi \xi_i(\mathbf{x}, t)}{1 + \tau \nu R \phi \xi_i(\mathbf{x}, t)}. \quad (2.1)$$

Dans cette expression, T est la période d'échantillonnage (s), τ est le temps mort du

détecteur (s), R est l'activité de la source (Beq), ν est le nombre de photons émis par désintégration, ϕ est le ratio *photopeak-to-total* et $\xi_i(\mathbf{x}, t)$ est l'efficacité du détecteur i par rapport à la position \mathbf{x} . Dans notre cas, puisque les frontières du domaine se déplacent en fonction de t , l'efficacité devient dépendante du temps.

2.2.2 Calcul de l'efficacité

Le défi majeur de l'approche consiste à calculer la valeur exacte de l'efficacité dans l'Eq.2.1.

Définition 2.1. Soit un détecteur k et une source rayonnante positionnée en \mathbf{x} . L'efficacité $\xi_k(\mathbf{x}, t)$ est donnée par :

$$\xi_k(\mathbf{x}, t) = \oint_{\Omega} \rho_d(\mathbf{r}, t) \rho_s(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\mathbf{r} \cdot d\mathbf{A}}{\|\mathbf{r}\|^3} \right), \quad (2.2)$$

où \mathbf{r} est le vecteur venant de \mathbf{x} et pointant en direction de la surface du détecteur, $d\mathbf{A}$ est le vecteur normal à un élément d'aire à la surface du détecteur et Ω est l'angle solide sous-tendu par le rayonnement.

Les fonctions $\rho_d(\mathbf{r}, t)$ et $\rho_s(\mathbf{r}, t)$ sont les fonctions de probabilités d'interaction avec le détecteur et la phase solide respectivement. Elles proviennent de l'intégrale curviligne de Beer-Lambert :

$$\int_0^{\sigma(t)} -\mu_d(s) ds = \ln(1 - \rho_d(\mathbf{r}, t)), \quad (2.3)$$

$$\int_0^{\ell(t)} -\mu_s(s) ds = \ln(\rho_s(\mathbf{r}, t)), \quad (2.4)$$

où $\sigma(t)$ et $\ell(t)$ sont les distances parcourues dans le détecteur et dans la phase solide respectivement. Ces distances dépendent du temps puisque les frontières du domaine se déplacent (c.f. figure 2.2). Les paramètres μ_s et μ_d sont les coefficients d'atténuation linéaires de la phase solide et du cristal de NaI respectivement. Le champ scalaire

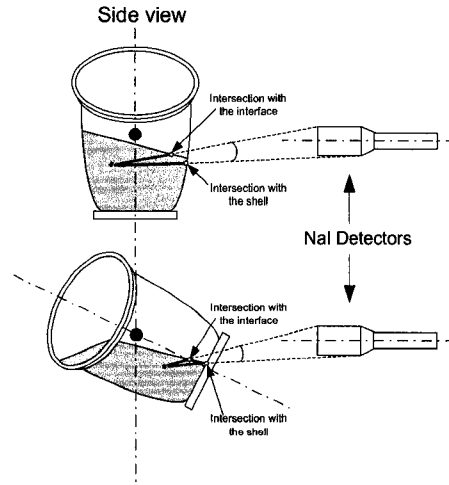


FIG. 2.2 – Illustration du mélangeur en V utilisé dans ce travail. Selon la position angulaire du mélangeur, le rayon gamma peut interférer avec l'interface ou la frontière.

d'atténuation est considéré comme homogène et isotrope dans la phase solide. Néanmoins, advenant une source d'information supplémentaire sur la distribution de la phase solide (e.g. par tomographie), l'intégrale de Beer-Lambert pourrait être évaluée plus précisément. Nous reviendrons à cet aspect dans la section 2.4.1. Pour l'atténuation du cristal, il s'agit d'une propriété spécifique du détecteur. Sa valeur dépend de l'énergie d'émission des photons. Une corrélation pour les cristaux de NaI peut être trouvée dans Snyder et Gyorey (1965).

Une approche numérique basée sur une méthode Monte-Carlo a été proposée pour calculer quasi exactement l'Eq. 2.2 (Beam et al., 1978). Cette méthode consiste à générer un nombre fini de directions à l'intérieur de l'angle solide et ainsi calculer exactement la valeur de ℓ et σ . Pour chaque direction aléatoire, une fonction poids Ω_i est évaluée correspondant à la valeur de l'angle solide.

Théorème 1. Soit α_{max} l'angle maximal sous-tendu par un cylindre de rayon r et une source ponctuelle située à une distance orthogonale d . Les angles maximum et mini-

mum sous-tendus le long de l'axe du cylindre sont respectivement β_{max} et β_{min} . La valeur de l'angle solide Ω est alors :

$$\Omega = \frac{\alpha_{max}}{2\pi} (\cos \beta_{min} - \cos \beta_{max}) \quad (2.5)$$

Démonstration. L'aire d'une section infinitésimale d'une sphère en coordonnées sphériques à une distance r de son origine est :

$$dA = r^2 \sin \beta d\beta d\alpha. \quad (2.6)$$

Ainsi, l'aire A d'une fraction de sphère sous-tendue par $\alpha_{min}, \alpha_{max}, \beta_{min}, \beta_{max}$ est donnée par :

$$A = \int_{-\alpha_{max}}^{\alpha_{max}} \int_{\beta_{min}}^{\beta_{max}} r^2 \sin \beta d\beta d\alpha \quad (2.7)$$

Par définition de l'angle solide, nous avons :

$$\Omega = \frac{1}{4\pi r^2} \int_{-\alpha_{max}}^{\alpha_{max}} \int_{\beta_{min}}^{\beta_{max}} r^2 \sin \beta d\beta d\alpha \quad (2.8)$$

$$= \frac{\alpha_{max}}{2\pi} (\cos \beta_{min} - \cos \beta_{max}) \quad (2.9)$$

□

La méthode de Monte-Carlo consiste à générer un nombre N de trajectoires en sélectionnant un doublet $\{\alpha^{(i)}, \beta^{(i)}\} \in [-\alpha_{max}, \alpha_{max}] \times [\beta_{min}^{(i)}, \beta_{max}^{(i)}]$. Posons deux vecteurs de nombres aléatoires $\{\chi, \omega : \chi^{(i)}, \omega^{(i)} \in [0, 1], i = 1 \dots N\}$. Alors, d'après la méthode de Beam et al. (1978), nous calculons un certain $\alpha^{(i)} = \alpha_{max}(2\chi^{(i)} - 1)$. De même, nous obtenons la valeur par $\beta^{(i)} = \arccos(\cos \beta_{min}^{(i)} - \omega^{(i)}(\cos \beta_{min}^{(i)} - \cos \beta_{max}^{(i)}))$. Le vecteur aléatoire prend alors la direction $\mathbf{l}^{(i)} = (\sin \beta^{(i)} \sin \alpha^{(i)}, \sin \beta^{(i)} \cos \alpha^{(i)}, -\cos \beta^{(i)})$. Les valeurs de $\beta_{min}^{(i)}$ et $\beta_{max}^{(i)}$ sont calculées géométriquement et plus de détails peuvent être trouvés dans Beam et al. (1978).

Corrolaire 2.1. Soit un doublet $\{\alpha^{(i)}, \beta^{(i)}\} \in [-\alpha_{max}, \alpha_{max}] \times [\beta_{min}^{(i)}, \beta_{max}^{(i)}]$. Alors, l'angle solide Ω_i est donné par :

$$\Omega_i = \frac{\alpha_{max}}{2\pi} \left(\cos \beta_{min}^{(i)} - \cos \beta_{max}^{(i)} \right) \quad (2.10)$$

Ceci découle directement du théorème 1. À l'aide du corollaire 2.1, la méthode Monte-Carlo pour le calcul de l'efficacité du détecteur k prend la forme suivante :

$$\xi_k(\mathbf{x}, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\Omega N} \sum_{i=1}^N \Omega_i e^{-\mu_s \ell_i} (1 - e^{-\mu_d \sigma_i}), \quad (2.11)$$

Ceci représente un angle solide pondéré par la probabilité de détection dans la direction d'émission. En pratique, la valeur de N est finie. Selon les études précédentes, le nombre de directions requises pour atteindre une précision suffisante est de l'ordre de 1000 (Larachi et al., 1994; Godfroy et al., 1997), ce qui est également conforme aux observations faites dans le cadre de ce travail.

2.2.3 Généralisation aux systèmes à frontières irrégulières

Le problème à ce point-ci de notre travail consiste à calculer la valeur exacte de $\ell(t)$ qui revient à calculer le point d'intersection entre le vecteur aléatoire $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^3$ provenant de \mathbf{x} et l'interface de la phase solide. Avec la technique actuelle, ce point d'intersection est calculé en résolvant la forme quadratique suivante :

$$x^2 + y^2 = r^2, \quad (2.12)$$

où $(x, y, z) = \ell \boldsymbol{\lambda} + \mathbf{x}$ et r est le rayon du cylindre. Malheureusement, dans le cas plus général de géométries complexes, il n'existe pas nécessairement d'expressions analytiques, semblable à l'Eq. 2.12 pour la forme de la frontière du domaine à partir de laquelle la valeur de ℓ peut être déterminée. L'idée proposée est de représenter le domaine V par un ensemble de noeuds $\mathbf{P}_i \in V$ qui forment un maillage irrégulier de type

P_1 . La frontière $\partial V \subset V$ est représentée par une tessellation de surface en utilisant les noeuds en périphérie de V . Ainsi, pour chaque noeud $\mathbf{P}_i \in V$, l'intersection avec le maillage de surface est calculée pour chacune des directions. Il s'agit d'un problème classique en infographie et le défi consiste à rendre cette opération performante. Le point d'intersection \mathbf{P} d'un vecteur unitaire $\boldsymbol{\lambda}$ provenant de \mathbf{x} et un plan π_0 avec un vecteur normal \mathbf{n} et tel que $\mathbf{P}_0 \in \pi_0$ peut être déterminé en résolvant :

$$(\mathbf{P} - \mathbf{P}_0) \cdot \mathbf{n} = 0. \quad (2.13)$$

Considérons un triangle T_n supporté par trois noeuds $\{\mathbf{P}_0, \mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2\} \in \partial V$ et une base de vecteurs $\mathbf{b} = \{\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{n}\}$ qui supportent le triangle avec $\mathbf{b}_1 = \mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_0$, $\mathbf{b}_2 = \mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_0$ et $\mathbf{n} = \mathbf{b}_1 \times \mathbf{b}_2$. Si $\mathbf{B} = [\mathbf{b}_1^T, \mathbf{b}_2^T, \mathbf{n}^T]^T$, le point d'intersection \mathbf{P} peut être exprimé par :

$$\mathbf{P} - \mathbf{P}_0 = \mathbf{kB}. \quad (2.14)$$

Pour un vecteur quelconque $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3$, les conditions nécessaires pour que $\mathbf{P} \in T_n$ sont que $\|\mathbf{k}\| \leq 1$ et $\mathbf{k} \in \mathbb{R}_+^3$ (Dhatt et Touzot, c1981). La valeur de $\ell(t)$ est calculée par $\ell = \|\mathbf{P} - \mathbf{x}\|$. Afin de diminuer les temps de calcul, une liste dynamique utilisant les tessellations est construite afin de déterminer les triangles qui sont le plus susceptibles d'être intersectés par les rayons émis à l'intérieur de l'angle solide le long de $\boldsymbol{\lambda}$. En effet, pour une position quelconque dans le domaine, les directions aléatoires sont nécessairement comprises à l'intérieur de l'angle solide (par construction). Conséquemment, les points d'intersection seront compris dans une sous région continue $S \subset \partial V$. Comme première approximation, S est construit en supposant un cône d'ouverture α . Un triangle $T_k \in S$ s'il existe au moins un noeud de T_k dans S . Plus précisément :

$$\boldsymbol{\delta}_i \cdot \boldsymbol{\lambda} \geq \cos \alpha, \quad (2.15)$$

où $\boldsymbol{\delta}_i$ est le vecteur unitaire provenant de \mathbf{x} et pointant en direction de \mathbf{P}_i . Si pour une direction aléatoire en particulier aucun triangle n'est trouvé dans S , tous les tri-

angles non testés de ∂V seront testés. Afin d'augmenter la performance, ce triangle sera ajouté à la liste. Dans le cas d'un domaine en mouvement, la position relative de l'interface change en fonction du temps et affecte directement l'efficacité par un changement de distance parcourue dans la phase solide et dans le détecteur (figure 2.2). Afin de tenir compte de la cinématique spécifique du domaine, les noeuds sont déplacés suivant une combinaison de rotations et de translations afin de représenter le plus fidèlement le déplacement réel du domaine.

Dans le cas de système avec frontières en mouvement, la présence d'une interface gaz solide a un impact majeur sur le calcul de l'efficacité puisque l'atténuation de l'air est négligeable par rapport à celle de la phase solide. En effet, le calcul de ℓ en utilisant la procédure décrite plus haut, qui consiste en la longueur totale parcourue dans le domaine V , peut mener, dans certains cas, à une surestimation de l'intégrale Eq. 2.4 et ainsi mener à une fausse valeur de l'efficacité. C'est pourquoi l'effet de l'interface devient plus important lorsque le traceur approche celle-ci ou se retrouve dans la phase gaz (i.e. au dessus de l'interface). Cet aspect sera abordé dans la section 2.4.1.

2.2.4 Reconstruction des trajectoires lagrangiennes

Avant le début de l'expérience, le traceur est positionné dans n positions spécifiques connues $\{\mathbf{x}_k\}_{k=1..n}$ afin de calibrer le signal obtenu par les discriminateurs (voir figure 2.1). L'activité de la source R , le temps mort du détecteur τ et le coefficient d'atténuation de la phase solide μ_s sont obtenus au moyen d'une régression non linéaire pour chaque détecteur j :

$$\min_{R, \tau, \mu_s} \sum_{k=1}^n \left(\frac{\Phi_j(\mathbf{x}_k) - \Phi_j^m}{\Phi_j(\mathbf{x}_k) + \Phi_j^m} \right)^2, \quad (2.16)$$

où $\Phi_j(\mathbf{x}_k)$ est le nombre d'événements associés à la position \mathbf{x}_k et Φ_j^m est la valeur mesurée. Les différences dans les valeurs de ces paramètres pour chaque détecteur pro-

viennent essentiellement des réglages particuliers des amplificateurs/discriminateurs. Dans le cas de μ_s , ceci peut provenir de l'anisotropie de la phase solide. Pour un système donné, un dictionnaire de comptes est généré et utilisé afin d'associer à chaque noeud, à l'aide d'un modèle, un ensemble d'événements qui devrait être enregistré par chaque détecteur (au moyen de l'Eq. 2.1). Ensuite, étant donné un ensemble de mesures, l'algorithme cherche le noeud $\mathbf{P}_i \in V$ tel que :

$$\min_{\mathbf{P}_i \in V} \sum_{j=1}^N \left(\frac{\Phi_j^m - \Phi_j(\mathbf{P}_i)}{\Phi_j^m + \Phi_j(\mathbf{P}_i)} \right)^2. \quad (2.17)$$

En utilisant un maillage, l'algorithme raffine la recherche en recherchant dans tous les tétraèdres T_p contenant le noeud \mathbf{P}_i la position \mathbf{x}_p qui minimise l'erreur :

$$\min_{\mathbf{x}_p \in T_p} \sum_{j=1}^N \left(\frac{\Phi_j^m - \Phi_j(\mathbf{x}_p)}{\Phi_j^m + \Phi_j(\mathbf{x}_p)} \right)^2. \quad (2.18)$$

La valeur des comptes en \mathbf{x}_p est obtenue par interpolation linéaire en utilisant la valeur aux noeuds de la tessellation correspondante.

2.3 Protocole expérimental

Dans cette section, nous allons présenter l'approche expérimentale utilisée afin d'appliquer et valider la méthode proposée.

2.3.1 Matériel

La méthode développée dans la section précédente a été appliquée sur un mélangeur en V de type Patterson-Kelley 16 quarts rempli avec 40% v/v de billes de verre de 3 mm de diamètre (2500 g/L) tel que présenté à la figure 2.3. La rotation du mélangeur est assurée par un moteur DC couplé à un engrenage 50 :1. Huit détecteurs

à scintillation (NaI-Tl) de 76mm × 76mm (Teledyne Isotope S1212-I) sont fixés autour du système avec des supports en aluminium. La distance de saturation est déterminée pour chacun des détecteurs lorsque les comptes enregistrés commencent à décroître au fur et à mesure que la source est éloignée. Chaque détecteur est relié à un tube à scintillation et le signal est amplifié par un amplificateur/discriminateur ORTEC ACE (925-Scint). La période d'échantillonnage pour l'expérience est fixée à 7.0 ms.

Le domaine est décomposé en 46 404 tétraèdres formés par 13 067 noeuds avec une taille de maille inférieure à 5 mm. La surface est approximée par 3 634 triangles, ce qui correspond à une taille de maille maximale de 1.5 cm. Afin de représenter la rotation du mélangeur, une discrétisation de 5° a été jugée adéquate afin de maintenir la précision désirée en utilisant une interpolation avec un polynôme de Lagrange du second degré. Le programme a été parallélisé en utilisant la librairie de communication MPI et a été exécuté sur 8 processeurs AMD OPTERON 246 (2.0 GHz) d'une grappe de calcul IBM à 64 processeurs. Le temps de calcul requis pour la génération d'un dictionnaire pour 72 positions angulaires, 8 détecteurs et le maillage décrit plus haut est de 7.5 heures. La reconstruction de 6 heures d'expériences requiert environ 30 minutes.

L'isotope utilisé pour la fabrication du traceur est du scandium 46 avec une activité initiale d'environ 125 μCi , qui émet des rayons gamma à des énergies de 889 et 1120 keV. Dans le modèle, ces deux rayons gamma sont considérés comme identiques avec une énergie d'émission moyenne de 1005 keV. Environ 5 mg d'oxyde de scandium ont été insérés dans une bille de verre et scellés, ce qui a mené à la formation d'une bille de verre similaire aux autres dans le mélangeur. Le traceur a été activé durant 5 jours dans le réacteur nucléaire Slowpoke de l'École Polytechnique de Montréal. Le traceur a été utilisé 5 jours après son activation afin de permettre aux autres isotopes présents

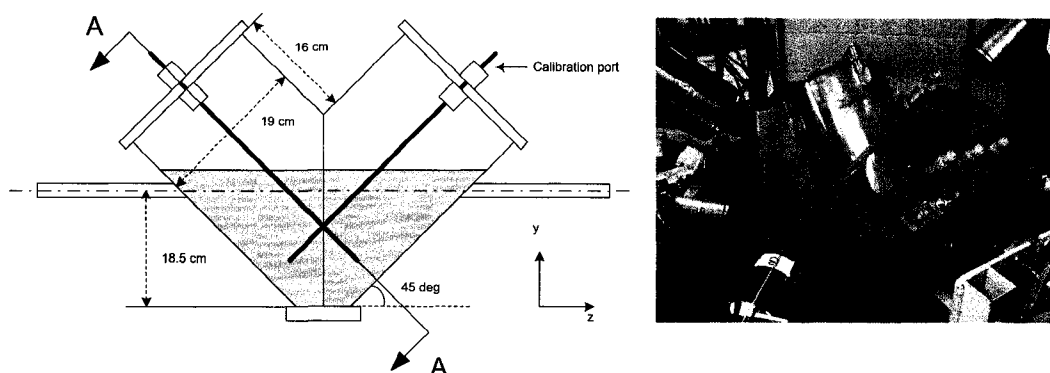


FIG. 2.3 – Dimensions du mélangeur en V étudié dans ce travail.

(tel que le sodium 24) de disparaître. Des traces d'isotopes radioactifs autres que le scandium 46 n'ont pas été détectées.

2.3.2 Calibration

Pour la calibration, le traceur a été introduit dans 12 positions axiales situées dans 6 ports en aluminium situés sur le couvercle du mélangeur (figure 2.3) pour un total de 72 points de calibration. Ces ports sont également distribués dans chaque tube du mélangeur en V, ce qui permet d'introduire une tige de Plexiglass dans chacun de ceux-ci afin de positionner le traceur dans des positions connues. Pour chaque position de calibration, les événements sont enregistrés durant 7.5 secondes. Les tubes d'aluminium préviennent la tige de Plexiglass de tout mouvement indésirable durant la mesure. Finalement, l'Eq. 2.16 est résolue en utilisant l'algorithme CONMIN pour la minimisation avec contrainte (Vanderplaats, 1978). L'erreur relative sur la régression pour chacun des points de calibration est gaussienne avec une moyenne nulle et un écart type de 2.5%, ce qui signifie que le modèle explique avec bonne précision les données expérimentales.

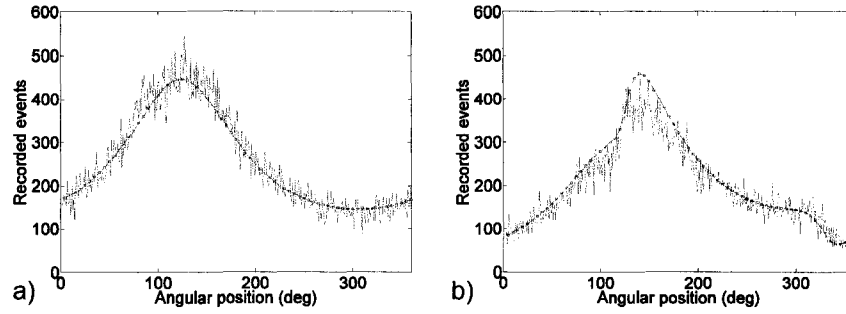


FIG. 2.4 – Effet de l’interface sur les comptes mesurés. La ligne pleine représente le signal mesuré et la ligne avec points représente la prédiction de notre modèle. Résultats obtenus pour différents niveaux de remplissage : a) 0% b) 40%.

2.4 Résultats et analyse

2.4.1 Effet de l’interface

La présence d’une interface dans le système affecte significativement le signal mesuré par les détecteurs. En effet, selon la position du traceur, une distance plus ou moins grande est franchie dans la phase solide, affectant d’autant l’atténuation au sens de Beer-Lambert (voir figure 2.2). C’est pourquoi une bonne connaissance de l’interface et de sa dynamique est requise afin d’effectuer une reconstruction précise. La stratégie proposée afin de considérer la présence de l’interface est basée sur la procédure de calibration. La surface est approximée par un plan mobile. Sa position et son orientation sont déterminées en modifiant la formulation du problème de minimisation de l’Eq. 2.16. Dans ce travail, deux nouvelles variables sont ajoutées, soit l’orientation angulaire θ du vecteur normal dans le plan xy , et la coordonnée y_0 d’un point du plan. En d’autres termes, le problème prend la forme suivante :

$$\min_{R, \tau, \mu_s, \theta, y_0} \sum_{k=1}^n \left(\frac{\Phi_j(\mathbf{x}_k) - \Phi_j^m}{\Phi_j(\mathbf{x}_k) + \Phi_j^m} \right)^2. \quad (2.19)$$

Il s'agit d'une mesure indirecte de la position de l'interface en utilisant la calibration. Suite à l'observation visuelle d'un mélangeur en V en mouvement, il a été convenu que l'orientation de l'interface demeure sensiblement constante sur une révolution complète, la valeur de θ étant proche de celle de l'angle de talus du matériau ($\sim 30^\circ$). Ainsi, la valeur de θ peut être déterminée en utilisant l'Eq. 2.19. La valeur de $y(t)$ est obtenue de la même manière en résolvant le même problème à $t = 0$ pour obtenir y_0 . De la même façon, une observation attentive du mouvement de l'interface a révélé une dynamique simple qui se traduit par une translation le long du champ gravitationnel, i.e. l'axe y dans le problème. Ainsi, le mouvement d'un point dans le plan représentant l'interface peut être approché par :

$$y(t) = y_0 + a \sin^2 \omega t, \quad (2.20)$$

où ω est la vitesse angulaire du mélangeur (rad/s) et a est l'amplitude du mouvement périodique. Afin d'illustrer l'effet de l'interface, un traceur a été fixé à une extrémité d'un point de calibration (voir figure 2.3) et soumis à 10 rotations avec deux différents niveaux de remplissage. Lorsque le mélangeur est initialement vide, il n'y a pas d'interférence avec la phase solide et l'interface, ce qui génère un signal périodique. Lorsque le mélangeur est complètement rempli, le signal est légèrement affecté par l'atténuation provenant de la phase solide selon la position du traceur par rapport au détecteur. Entre ces cas limites, la présence d'une interface affecte le nombre d'événements mesurés. Ceci est observé sur la figure 2.5 qui montre un profil du nombre d'événements le long de la coupe A-A (voir figure 2.3) avec un niveau de remplissage de 40% durant une révolution complète.

D'abord, la figure 2.4a présente les comptes en fonction de la position angulaire du mélangeur en V lorsqu'il est vide. On peut observer que le modèle prédit avec une bonne précision le nombre d'événements enregistrés par le détecteur. Puisqu'il n'y a

pas d'atténuation avec un niveau de remplissage nul, ceci indique que le modèle pour le calcul de la variation d'angle solide provenant du déplacement du traceur est bien implanté. Ensuite, tel que présenté à la figure 2.4b, qui correspond à un remplissage de 40%, la phase solide et la position de l'interface influencent le niveau d'atténuation, ce qui crée des interactions non négligeables entre les photons émis et les particules, de sorte qu'une réduction du signal est perçue. Conséquemment, afin de positionner avec précision le traceur dans le domaine, le modèle doit pouvoir connaître la position de l'interface. On peut conclure à partir des résultats de la figure 2.4 que l'approche proposée est fiable pour prédire le nombre d'événements enregistrés pour toutes les positions du traceur dans le domaine.

La technique de RPT proposée repose donc sur une connaissance *a priori* de la position et de la forme de l'interface dans le domaine. Dans le cas d'un mélangeur en V, trois paramètres (y_0, θ, a) sont utilisés à cette fin. Cette méthode pourrait être étendue à d'autres mélangeurs ou géométries, mais pourrait nécessiter davantage de paramètres pour décrire correctement la dynamique de l'interface. Il ne fait aussi aucun doute que le champ scalaire de densité dans le domaine provenant, par exemple, de techniques tomographiques, pourrait faciliter grandement l'obtention de ces paramètres.

2.4.2 Validation

La technique de RPT généralisée est validée dans quatre différentes situations. D'abord, la trajectoire d'un traceur en mouvement dans un lit fluidisé a été reconstruite et comparée à des résultats obtenus par la méthode originale. Les solutions obtenues avec les différentes techniques sont similaires et les quelques différences sont liées aux critères de convergence et aux choix des algorithmes d'optimisation. Ensuite,

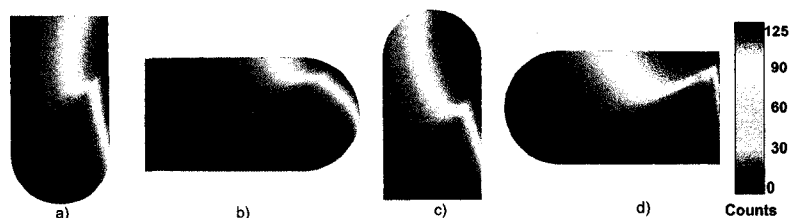


FIG. 2.5 – Profil du nombre de comptes le long de la tranche A-A du mélangeur en V à partir du détecteur 1 montrant la forte anisotropie induite par l'interface : a) $\theta = 0$, b) $\theta = \pi/2$, c) $\theta = \pi$, d) $\theta = 3\pi/2$.

la position des 72 points de calibration a été reconstruite avec une bonne précision (en moyenne une erreur de 1.5 mm sur la position de la particule). Le troisième cas consiste à placer un traceur dans un port de calibration et à initier la rotation du système vide à des vitesses entre 20 et 60 rpm. Un résultat typique à 20 rpm est présenté aux figures 2.6a et 2.6b, montrant la composante x de la position de même que de la vitesse. Des résultats similaires sont obtenus pour les composantes y et z . Aucune perte de précision n'a été détectée à des vitesses plus élevées.

La quatrième validation est similaire à la troisième sauf que, dans ce cas-ci, le niveau de remplissage a été fixé à 40% afin de représenter les conditions expérimentales. Dans ce cas, l'effet de l'interface joue un rôle majeur, le traceur étant libre de s'y retrouver lors d'une révolution complète. Les résultats correspondants, présentés aux figures 2.6c et 2.6d, montrent également une bonne compatibilité entre la position réelle du traceur et la position obtenue avec la méthode, bien que l'erreur entre celles-ci soit supérieure au cas impliquant le mélangeur vide. Ceci est particulièrement vrai lorsque le traceur sort et entre dans la phase solide (i.e. au temps 2.5-5.5 s) qui est lié à l'interface. Une autre source d'erreur est l'hypothèse que l'interface est plane, ce qui est en fait une approximation. Néanmoins, nous devons observer que les troisième et

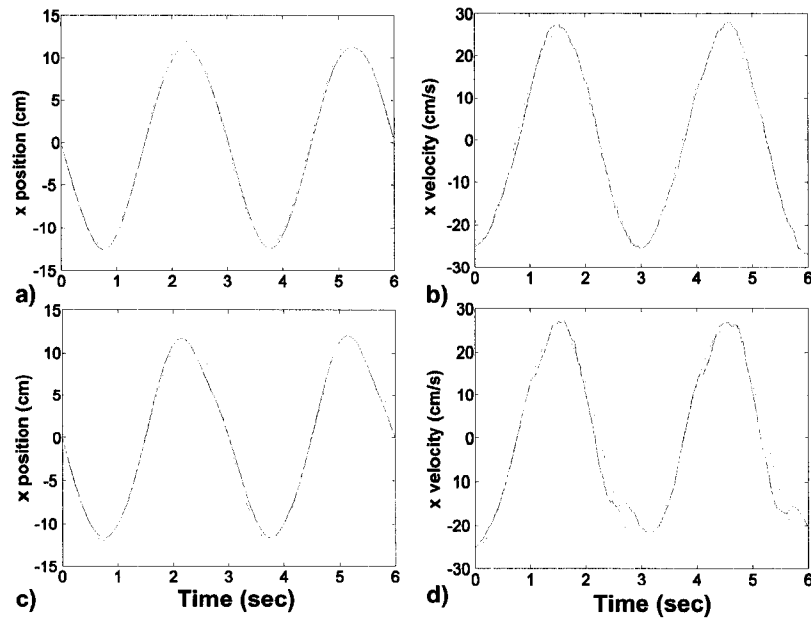


FIG. 2.6 – Validation avec un traceur fixe dans un mélangeur en V vide à 20 rpm. La ligne en tirets représente la position réelle et la ligne pleine représente la position obtenue par RPT. (a)-(b) : La position (cm) et la vitesse (cm/s) dans le mélangeur vide. (c)-(d) : La position (cm) et la vitesse (cm/s) avec un niveau de remplissage de 40% (v/v).

quatrième validations sont des cas extrêmes puisqu'en pratique, le traceur ne sera pas maintenu fixe dans le domaine, mais sera plutôt en mouvement avec l'ensemble des autres particules, ayant pour effet que le traceur ne sortira pas de l'interface aussi brutalement. Afin de compléter cette discussion, et afin de mieux comprendre pourquoi les erreurs sont maximales lorsque le traceur est hors du lit de particules, une analyse de sensibilité, tel que détaillée par Godfroy et al. (1997) est présentée.

2.4.3 Analyse de sensibilité

Définition 2.2. La sensibilité S d'une fonction ϕ par rapport à une variable x est définie par

$$S(x) = \frac{1}{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial x} = \frac{\partial \ln \Phi}{\partial x}. \quad (2.21)$$

Dans notre cas, ceci représente le changement du nombre d'événements enregistrés lorsque le traceur subit un infinitésimal déplacement dx . Suivant les travaux de Roy et al. (2002), dans le cas d'un arrangement comportant N détecteurs, la sensibilité globale S_T est donnée par

$$S_T^2(x) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial x} \right)^2. \quad (2.22)$$

Aussi, la résolution $R(x)$ est donnée par

$$R(x) = \frac{1}{S(x) \sqrt{\Phi}}. \quad (2.23)$$

Cette valeur est reliée à la précision de la reconstruction. Plus la sensibilité est élevée, meilleure est la résolution. La figure 2.7 présente le profil de sensibilité S_T le long de la coupe $A-A$. On voit alors que la sensibilité est plus faible lorsque le traceur est hors de la phase solide. La résolution sera alors plus grande dans ce cas. Ainsi, la précision de reconstruction est plus élevée lorsque le traceur est dans la phase solide, une situation réelle en pratique.

2.4.4 Champ de vitesses moyennes

Le champ de vitesses moyennes est obtenu en moyennant les vitesses instantanées du traceur dans tout le domaine. Un signal typique obtenu par la RPT est présenté à la figure 2.8. À chaque pas de temps, le traceur est localisé dans un maillage et la vitesse moyenne dans chaque maille pour toute la série de données est calculée. Un

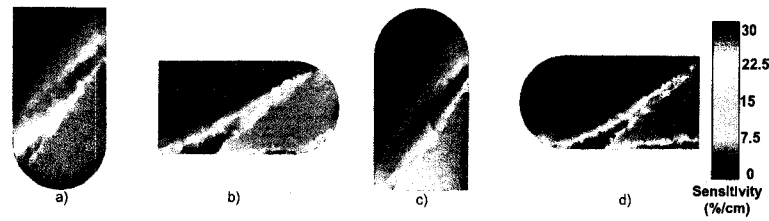


FIG. 2.7 – Profil de sensibilité S_T (%/cm⁻¹) le long de la coupe A-A du mélangeur en V :
a) $\theta = 0$, b) $\theta = \pi/2$, c) $\theta = \pi$, d) $\theta = 3\pi/2$.

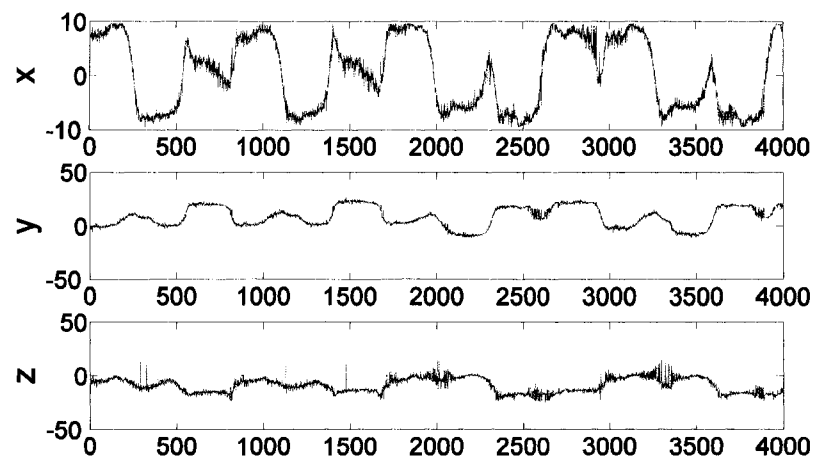


FIG. 2.8 – Signal typique obtenu montrant les coordonnées x , y , et z durant 4096 points de mesure avec une période d'échantillonnage de 7 ms.

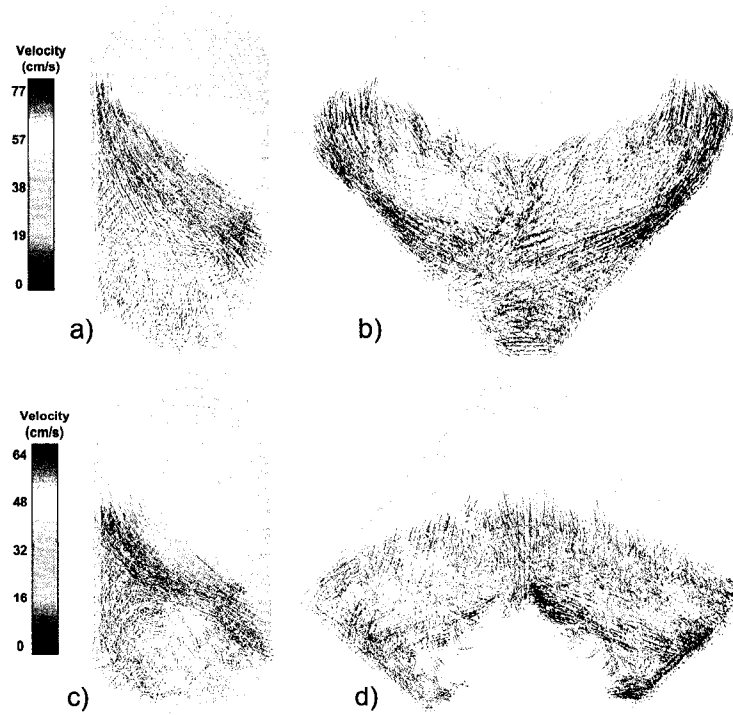


FIG. 2.9 – Champs de vitesses moyennes typiques obtenus après reconstruction des trajectoires. (a)-(b) : Position angulaire $\theta \in [0^\circ, 5^\circ]$ (cm/s). (c)-(d) : Position angulaire $\theta \in [177.5^\circ, 182.5^\circ]$ (cm/s).

maillage grossier a été utilisé afin d'augmenter le nombre d'occurrences par maille. La figure 2.9 montre le champ de vitesses moyennes pour différentes positions angulaires. Ceci représente la vitesse moyenne sur un intervalle de $\pm 5^\circ$. En particulier, une avalanche de particules est clairement visible sur les figures 2.9a et 2.9c, ces particules ayant une vitesse relativement plus élevée. Une attention particulière à la figure 2.9 révèle que, même si l'interface est considérée comme plane, par hypothèse lors de la reconstruction, sa position ainsi que sa forme semblent néanmoins conformes aux observations visuelles. Tel que relevé précédemment, l'interface réelle est une combinaison de deux plans qui se rejoignent le long de l'axe de symétrie du mélangeur en V.

La raison pour laquelle la reconstruction retrouve la forme originale sans égard à l'hypothèse du plan, vient du fait que, lorsque le problème de minimisation de l'Eq. 2.17 et l'Eq. 2.18 est résolu, plus d'importance est accordée aux détecteurs à faibles comptes, ce qui vient du dénominateur. Par exemple, lorsque le traceur est près de l'interface, plus d'importance est donnée aux détecteurs derrière cette interface, puisqu'une distance supérieure est parcourue dans la phase solide, ce qui mène à un nombre inférieur de comptes. Conséquemment, puisque le signal mesuré dans ce cas est moins affecté par la forme et la position de l'interface, l'erreur résultant de l'approximation du plan pour cette interface est faible.

2.5 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons développé une méthode généralisée de RPT afin de résoudre le problème inverse dans le cas de systèmes avec frontières mobiles irrégulières. Cette méthode généralisée, basée sur la méthode de Monte-Carlo originale (Larachi et al., 1994), utilise un maillage irrégulier pour représenter la géométrie du domaine. Cette approche rend possible l'étude de l'écoulement dans des systèmes avec des géométries complexes (e.g. mélangeur tête, mélangeur en V) en obtenant la trajectoire lagrangienne d'un traceur radioactif en mouvement dans l'écoulement.

Cette méthode de RPT a d'abord été présentée en détail. Quatre différentes validations ont ensuite été présentées sous différentes conditions opératoires afin de déterminer la robustesse et la fiabilité de la technique. Une analyse de sensibilité a également été faite afin d'expliquer l'effet de l'interface sur la précision de la reconstruction. Cette méthode a finalement été appliquée avec succès sur un mélangeur en V afin de générer les champs de vitesses moyennes.

Dans les chapitres suivants, nous allons présenter les analyses plus avancées qu'il est possible d'effectuer sur les trajectoires lagrangiennes afin, en particulier, d'extraire des propriétés macroscopiques de mélange ainsi que les caractéristiques de la dynamique chaotique de l'écoulement.

Chapitre 3

Application de la théorie du chaos en mélange granulaire

3.1 Contexte

[†] Dans le cadre du chapitre précédent, nous nous sommes dotés d'un outil de mesure qui nous permet d'obtenir l'ensemble des trajectoires lagrangiennes denses dans un espace compact que nous allons noter par Ω . Nous allons dire que ces trajectoires sont une mesure de l'écoulement $\phi(x, t)$ sur Ω . Les propriétés de $\phi(x, t)$ sur cet espace sont facilement accessibles lorsque nous avons une série de données dans le temps qui permettent de suivre l'évolution du système. C'est l'objectif du présent chapitre d'introduire les concepts fondamentaux requis pour l'analyse d'une série de données finies, disons $\{x_1, x_2, \dots, x_m\}$ qui représentent la position d'une particule en fonction

[†] Ce chapitre a été, en partie, publié dans J. Doucet, F. Bertrand and J. Chaouki, *Experimental characterization of the chaotic dynamics of cohesionless particles : application to a V-blender*, Granular Matter, (2008) volume 10, p. 133-138. (doi :10.1007/s10035-007-0075-x)

du temps.

Dans un premier temps, nous allons introduire l'important théorème ergodique qui permet de développer une panoplie de propriétés d'un écoulement $\phi(\Omega, t)$ sur la foi de la mesure d'une seule trajectoire. Nous allons ensuite rappeler les définitions de Devaney (1988) au sujet du chaos déterministe. Certaines propriétés de séries de données seront ensuite présentées.

La dernière section de ce chapitre présente les résultats de validation des méthodes proposées. Nous allons appliquer les algorithmes de Grassberger et Procaccia (1983b) sur une famille de systèmes dynamiques connus dont les propriétés chaotiques sont connues. Ceci permettra de valider l'implantation numérique avant de l'appliquer sur une véritable série de données.

3.2 Introduction

Dans ce chapitre, et quelques chapitres subséquents, nous allons utiliser la notion de mesure et d'espace de probabilité. Un espace de probabilité, noté par le triplet (X, \mathcal{B}, μ) définit un ensemble de variables X sur un sous-ensemble d'espaces mesurables \mathcal{B} doté d'une mesure μ telle que $\mu(\mathcal{B}) = 1$. On dit que μ est une mesure de probabilité. Nous allons aussi utiliser des fonctions $f \in L^p(\Omega)$ où l'ensemble $L^p(\Omega)$ est l'ensemble des fonctions Lebesgue intégrables sur un espace mesurable Ω . Ces notions reviendront successivement dans les chapitres suivants.

3.3 Le théorème ergodique

Ce théorème est à la base de notre approche expérimentale. En effet, la méthode de RPT développée au chapitre 2 permet d'obtenir une série de données qui consiste

en la position d'un seul traceur en fonction du temps, i.e. une série $\{x_1, x_2, \dots, x_m\}$ où la dimension m de la série de données dépend du temps d'observation du système. Autrement dit, si le système est observé à une période T , alors le temps total t d'observation d'une série de dimension m est $t = mT$. Le théorème ergodique stipule alors qu'à la limite, l'observation d'une seule trajectoire d'un système pendant une période infinie est équivalente à observer toutes les trajectoires sur un espace compact $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. En d'autres termes, on considère un espace de probabilité (X, \mathcal{B}, μ) , $\phi \in L^1(\mu)$ et $T : X \mapsto X$ une transformation préservant la mesure. Alors si T est ergodique :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \phi(T^k x) = \int \phi(d\mu) \quad (3.1)$$

pour tout x .

3.4 Définition de chaos

Plusieurs travaux en mélange réfèrent aux travaux de Ottino (1989) lorsque l'on traite de la notion de chaos en fluide. En effet, la majorité des travaux en fluide adoptent une approche systématique de caractérisation de la dynamique chaotique afin d'obtenir de l'information sur l'efficacité de mélange dans les écoulements laminaires de même que sur la structure même de l'écoulement (Ottino, 1989; Franjone et Ottino, 1987; Heniche et al., 2005a). Néanmoins, ce n'est que récemment que l'intérêt s'est porté vers l'application de cette approche aux écoulements particuliers, notamment par les travaux importants de Khakhar et al. (1999).

Une condition nécessaire à la présence de chaos au sens de Devaney (1988) réside dans la sensibilité d'un écoulement $\phi(x, t)$, sur un espace compact Ω , à ses conditions initiales x_0 . Nous allons présenter ici la définition stricte de sensibilité aux conditions initiales.

Définition 3.1. Soit un ensemble compact $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ invariant sous l'écoulement $\phi(x, t)$ (i.e. $\phi(\Omega, t) \subset \Omega$ pour tout $t \geq 0$). L'écoulement $\phi(x, t)$ est dit sensible aux conditions initiales sur Ω s'il existe un $\epsilon > 0$ tel que pour tout $x \in \Omega$, et tout voisinage U de x , il existe un $y \in U$ pour tout $t > 0$ tel que $|\phi(x, t) - \phi(y, t)| > \epsilon$.

Autrement dit, pour tout point $x \in \Omega$, il existe (au moins) un point arbitrairement proche dans Ω qui diverge de x . À partir de cette définition, une définition plus générale d'un espace chaotique est proposée.

Définition 3.2. L'ensemble compact Ω est dit chaotique si : a) $\phi(x, t)$ a une sensibilité aux conditions initiales sur Ω , b) $\phi(x, t)$ est topologiquement transitif sur Ω , c) les orbites périodiques de $\phi(x, t)$ sont denses dans Ω .

Cette définition requiert la transitivité topologique et une couverture dense de l'espace par les trajectoires périodiques. La transitivité topologique indique que tout voisinage dans l'espace d'un système chaotique est éventuellement visité par une trajectoire d'un point placé dans un autre voisinage. La troisième condition signifie que l'ensemble des orbites périodiques dans Ω est tel qu'entre n'importe quels points arbitrairement voisins dans Ω , il existe une autre trajectoire qui est aussi dans Ω . Pour le reste de l'analyse, nous allons poser que les conditions nécessaires sont remplies, i.e. que les trajectoires sont denses et que l'écoulement est transitif dans l'espace.

Tel qu'indiqué précédemment, ce n'est que récemment que la présence du chaos en mélange granulaire est apparue par les travaux de Khakhar et al. (1999). La majorité des travaux ont été effectués sur des mélangeurs sphériques et cubiques par Gilchrist (2003); Gilchrist et Ottino (2003). En particulier, ils ont identifié que le mélange dans les mélangeurs sphériques est faible en raison du fait que les lignes d'écoulement ne s'intersectent pas et que l'étirement d'un élément de volume est linéaire, ce qui est une

caractéristique de systèmes non chaotiques (Jain, 2004; Ottino, 1989). En appliquant une vitesse angulaire avec oscillations périodiques ou en créant des systèmes de mélange avec frontières irrégulières, l'émergence de chaos a pu être observée (Khakhar et al., 1999).

La présence abondante d'équipements de mélange dans l'industrie n'a pas su motiver autant d'intérêt dans l'étude du chaos comme point de départ pour une quantification de la dynamique de mélange. En effet, la majorité des travaux impliquant la caractérisation de la dynamique chaotique des systèmes particuliers ont été effectués dans des réacteurs polyphasés, dont particulièrement en lits fluidisés (Cassanello et al., 1995; Kiared et al., 1997; Larachi et al., 1996; Limtrakul et al., 2005; Larachi et al., 1995a; Cassanello et al., 1996, 1999; Roy et al., 1994; Hay et al., 1995) et dans les colonnes à bulles (Hay et al., 1996).

3.5 Mesure du chaos par analyse des signaux

Dans cette section, nous allons introduire plusieurs concepts propres à la théorie du chaos qui servent à définir une mesure de la dynamique du système. Soit l'espace de probabilité (X, \mathcal{B}, μ) , une série de données et un champ X , lequel associe pour chaque $n \in \mathbb{N}$ une valeur $X(n)$.

Définition 3.3. *La série $X(n)$ est dite stationnaire s'il existe une mesure de probabilité μ_k dans \mathbb{R}^k si pour tout opérateur $g : \mathbb{R}^k \mapsto \mathbb{R}$, nous avons :*

$$\int_{\mathbb{R}^k} g d\mu_k = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} g(X(i), \dots, X(i+k-1)) \quad (3.2)$$

Le terme de droite dans Eq. 3.2 représente l'espérance de l'opérateur g . En d'autres termes, une série est dite stationnaire si sa moyenne est constante dans le temps.

3.5.1 Dimension de l'attracteur

Il est relativement commun que les expériences et simulations de systèmes dynamiques révèlent un régime transitoire suivi d'un régime asymptotique. Conséquemment, il devient naturel qu'un point $f(\mathbf{x}, t)$ qui représente le système se situe sur un bassin attractif. Il est toutefois reconnu que plusieurs systèmes dissipatifs non linéaires n'approchent pas d'états stationnaires de manière asymptotique, mais tendent plutôt vers des attracteurs étranges autour desquels le mouvement est chaotique (Grassberger et Procaccia, 1983c; Eckmann et Ruelle, 1985). D'après Eckmann et Ruelle (1985), il existe différents types d'attracteurs tels que a) les points fixes, b) les orbites attractives, c) les attracteurs quasi-périodiques et d) les attracteurs étranges (e.g. Henon, Feigenbaum). Ce qui est proposé dans ce travail est de pousser davantage la caractérisation des attracteurs présents dans les systèmes de mélange dans des situations de mélange plus complexes. En effet, bien que les sections de Poincaré soient une approche commune et relativement simple pour effectuer la caractérisation des trajectoires, elles ne révèlent qu'une partie des informations de l'évolution des trajectoires. Nous allons ici introduire cette définition de Eckmann et Ruelle (1985) d'un attracteur.

Définition 3.4. *Un attracteur est un ensemble d'états invariants sous une dynamique que les états voisins d'un bassin d'attraction approchent asymptotiquement au cours de l'évolution du système.*

La dimension d'un attracteur est le premier niveau d'information atteignable pour caractériser ses propriétés. Plusieurs dimensions existent, soit basées sur une métrique (e.g. capacité et dimension de Hausdorff) ou sur les dimensions probabilistiques (e.g. capacité- ϑ , dimension- ϑ). Les définitions détaillées de ces dernières peuvent être trouvées dans la revue remarquable de Farmer et al. (1983). Les travaux précé-

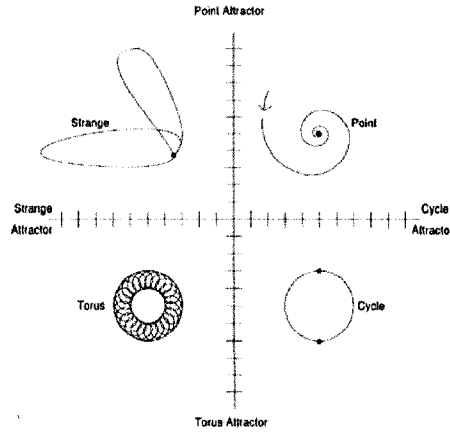


FIG. 3.1 – Différents types d'attracteurs.

dents de Cassanello et al. (1999, 1995) ont prêté une attention particulière à la mesure de la dimension de Hausdorff dans les réacteurs polyphasés afin de démontrer la présence de chaos dans ces systèmes, tel que le suggéraient les travaux de Daw et al. (1990); Daw et Halow (1992). Afin de pouvoir caractériser la dimension des attracteurs présents, l'algorithme de Grassberger et Procaccia (1983b) a été utilisé afin d'obtenir cette mesure à partir d'une série de données reliant la position d'un traceur au cours du temps dans un espace.

Dans notre cas, nous désirons obtenir la corrélation de la distance entre différentes positions formant une suite $\{x_i\}_{i=1\dots N}$ dans un espace compact Ω . Pour ce faire, l'approche consiste à construire un vecteur de plongement $\mathbf{X} = \{X_1, X_2, \dots, X_M\}$. Chaque élément est donné par le m -tuplet $X_i = \{x_i, x_{i+J}, \dots, x_{i+(m-1)J}\}$ où m est dit la dimension de plongement et J est la période. Ainsi, \mathbf{X} est un vecteur contenant M entrées de m -tuplets avec $M = N - (m - 1)J$. Cette méthode de plongement par délais a été proposée par Takens (1981) et il est démontré que cette transformation est difféomorphe par le théorème de plongement. Dans le cas d'une trajectoire dans \mathbb{R}^3 , une

généralisation peut être effectuée. Par exemple, si nous avons la suite de N positions :

$$\begin{aligned} & x_1, y_1, z_1 \\ & x_2, y_2, z_2 \\ & \dots \\ & x_N, y_N, z_N, \end{aligned}$$

alors, nous construirons la séquence suivante :

$$\{\hat{x}\} = \{x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_N, y_N, z_N\}, \quad (3.3)$$

de sorte que chaque m -tuplet sera donné par $X_i = \{\hat{x}_i, \hat{x}_{i+J}, \dots, \hat{x}_{i+(m-1)J}\}$. Le plongement aura alors M entrées tel que $M = 3N - (m - 1)J$.

Ce travail de plongement est nécessaire pour la simple raison que le nombre de dimension de l'écoulement (et non de l'espace Ω) est inconnu. Par exemple, bien que le système à l'étude supporte 3 dimensions (i.e. x, y, z), l'écoulement peut présenter plus (ou moins) de dimensions. Ceci est le cas dans les écoulements avec conditions frontières périodiques pour lesquels la variable de temps est absolument nécessaire pour décrire l'écoulement. Ainsi, afin d'étudier correctement le système, il faut être en mesure d'utiliser des coordonnées représentant les points de l'écoulement dans suffisamment de dimensions pour pouvoir permettre sa caractérisation. Avec le théorème de Takens (1981) et en utilisant la méthode des délais, il est donc possible de générer autant de dimensions à partir d'une série de données.

Posons $H(x)$ la fonction de Heaviside[†]. Alors, la fonction de corrélation $C(\epsilon)$ pour un plongement de dimension m devient (Spratt, 2003) :

$$C(\epsilon) = \frac{2}{N(N-1)} \sum_{j=1}^N \sum_{i=j+1}^N H(\epsilon - r_{ij}) \quad (3.4)$$

[†]i.e. $H(\epsilon, r) = 1$ si $r < \epsilon$, 0 sinon.

avec $r_{ij} = \|X_i - X_j\|$. Pour les besoins de l'analyse, nous allons supposer que Ω forme un espace de Lebesgue avec la norme $L_2(\Omega)$ qui prend alors la forme :

$$\|X_i - X_j\|^2 = \sum_{k=1}^m (x_{i+(k-1)J} - x_{j+(k-1)J})^2 \quad (3.5)$$

Cette fonction $C(\epsilon)$ est en fait le nombre de points à l'intérieur d'un cercle de rayon ϵ normalisé, de telle façon à ce que $C(\epsilon) = 1$ lorsque ϵ est suffisamment grand pour inclure tous les points de l'espace. Afin de déterminer la *dimension de corrélation* ν , nous posons, tel que proposé originalement par Grassberger et Procaccia (1983a), que cette double somme suit une loi donnée par :

$$C(\epsilon) \sim \epsilon^\nu \quad (3.6)$$

Tel que largement discutée dans la littérature, cette valeur de ν est une approximation de la véritable mesure de la dimension de Hausdorff D de l'attracteur tel que $\nu \lesssim D$. En effet, il y a autant de manières de calculer une dimension d'un attracteur, mais aucune ne peut véritablement prétendre mesurer la véritable dimension de l'attracteur (Sprott, 2003). Néanmoins, la représentation physique de cette dimension est le nombre de modes actifs dans le système ou encore le nombre de degrés de libertés (Theiler, 1986) et constitue une des mesures les plus communes pour caractériser l'étrangeté des attracteurs (Farmer et al., 1983; Grassberger et Procaccia, 1983a). En suivant les définitions acceptées (Farmer et al., 1983; Eckmann et Ruelle, 1985; Grassberger et Procaccia, 1983a), la dimension généralisée est définie de la façon suivante :

Définition 3.5. *La dimension de corrélation généralisée est définie par :*

$$\nu = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{d \ln C(\epsilon)}{d \ln \epsilon}. \quad (3.7)$$

En pratique, il est facile de voir que la dimension de corrélation ν peut être obtenue en traçant $\ln(C(\epsilon))$ versus $\ln(\epsilon)$ et alors la pente de la droite est ν . Dans le cas où la

série de données est finie de dimension N , la valeur de ϵ ne peut être inférieure à la plus petite des N^2 distances dans l'espace prolongé. Cet aspect spécifique est traité en détail par Theiler (1986). Dans le contexte de ce travail, nous allons poser l'hypothèse que la série de données couvre une période de temps d'observation suffisante, i.e. la plus longue période du système est au moins inférieure au temps d'observation. Le choix de la dimension de plongement m est préférablement choisie telle que $m \geq 2D + 1$ (Takens, 1981).

3.5.2 Exposant caractéristique

Un aspect important des systèmes dynamiques repose sur l'étude de l'évolution de la distance entre deux points initialement infiniment voisins (figure 3.2). En d'autres termes, il est important de définir les propriétés de stabilité d'une orbite sur un attracteur. Pour ce faire, considérons un système avec m dimensions dans l'espace de phase Γ . Au temps $t = 0$, le système est en \mathbf{x}_0 dans l'espace. Le système évolue dans le temps suivant un écoulement $\phi(\mathbf{x}_0, t)$. Si les conditions initiales sont perturbées infinitésimalement par $\delta\mathbf{x}_0$, le système évolue alors suivant une trajectoire infinitésimalement différente soit $\phi + \delta\phi$ spécifiée par :

$$\delta\phi(\mathbf{x}_0, t) = \mathbf{M}(t) \cdot \delta\mathbf{x}_0, \quad (3.8)$$

où la matrice $\mathbf{M}(t)$ est la matrice jacobienne de la transformation ϕ évaluée en \mathbf{x}_0 .

Définition 3.6. *Les indices de Lyapunov λ_i sont les taux de croissance d'une perturbation moyenne $\delta\mathbf{x}_0$ donnés par :*

$$\lambda_i = \lim_{t \rightarrow \infty} \ln |\mu_i(t)|, \quad (3.9)$$

où μ_i est la i^{eme} valeur propre de $\mathbf{M}(t)$.

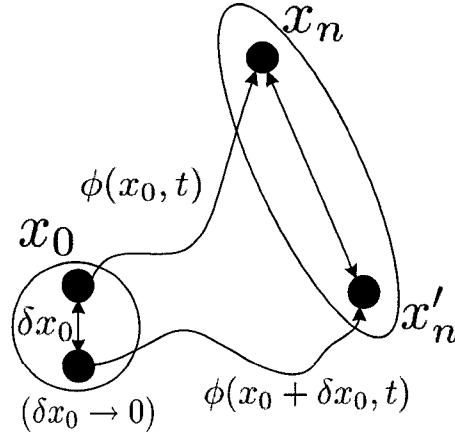


FIG. 3.2 – Deux particules initialement infiniment voisines suivront deux évolutions distinctes selon le niveau de chaos présent dans le système. Le taux de séparation exponentiel des trajectoires est donné par l'exposant de Lyapunov.

Il existe deux approches courantes pour le calcul de l'exposant maximal de Lyapunov. La première consiste à rechercher dans la série de données, deux points très voisins et leurs trajectoires sont suivies jusqu'à ce que cette distance devienne très grande (algorithme de Wolf). Tel que discuté par Sprott (2003), cet algorithme assume, mais ne vérifie pas la divergence exponentielle et ne peut alors pas distinguer le chaos du bruit de la mesure. Afin de surpasser cette limitation, une méthode alternative a été proposée. Le point le plus proche X_l de chaque point X_n du plongement de dimension m est d'abord cherché (Rosenstein et al., 1993). Le taux logarithmique moyen de séparation de ces deux points pour les k itérations suivantes est ensuite donné par :

$$L_k = \frac{1}{2(N - k - m + 1)} \sum_{n=m}^{N-k} \log \|X_{l-k} - X_{n-k}\|^2 \quad (3.10)$$

La valeur de l'indice de Lyapunov maximal est ensuite calculée par :

$$\lambda_1 = \frac{dL_k}{dk}, \quad (3.11)$$

pour des valeurs intermédiaires de k . Tel que discuté dans les références citées précé-

demment, de petites valeurs de k doivent être ignorées puisque les points n'ont pas eu suffisamment de temps pour s'aligner le long des directions d'expansion maximales et certaines erreurs numériques (e.g. arrondis et bruit) peuvent brouiller la mesure de la séparation. D'un autre côté, de grandes valeurs de k doivent être aussi ignorées puisque la séparation entre les particules atteint ultimement la dimension de l'attracteur.

3.5.3 Entropie de Kolmogorov

Une quantité intéressante pour les systèmes chaotiques réfère au taux de perte de prédictibilité. L'entropie de Kolmogorov-Sinai décrit le taux maximal auquel le système produit de l'information sur ses trajectoires dans l'espace de phase (de Wijn, 2005). Son inverse constitue une approximation du temps en deçà duquel une prédiction raisonnable demeure envisageable. La perte d'information dans les systèmes chaotiques provient de la divergence exponentielle de trajectoires infiniment voisines.

Considérons un système dynamique avec ν degrés de liberté. Supposons que l'espace de phase de dimension ν est partitionné en boîtes de dimensions ϵ^ν . Supposons qu'il existe un attracteur dans l'espace de phase et que la trajectoire $\mathbf{x}(t)$ est dans le bassin d'attraction. Les états du système sont alors mesurés à intervalles de temps τ . Soit $p(i_1, i_2, \dots, i_d)$ la probabilité d'avoir $\mathbf{x}(t = \tau)$ dans la boîte i_1 , $\mathbf{x}(t = 2\tau)$ dans la boîte i_2 , ..., et $\mathbf{x}(t = d\tau)$ dans la boîte i_d . L'entropie de Kolmogorov est alors définie par :

$$K = - \lim_{\substack{d \rightarrow \infty \\ \tau \rightarrow 0 \\ \epsilon \rightarrow 0}} \frac{1}{d\tau} \sum_{n=1}^d p(i_1, \dots, i_n) \ln p(i_1, \dots, i_n). \quad (3.12)$$

Des valeurs positives de l'entropie indiquent une évolution chaotique, des valeurs infinies indiquent une évolution complètement aléatoire et une valeur nulle indique un système ordonné (Grassberger et Procaccia, 1983b; Cassanello et al., 1995). D'un point

de vue analytique, il est relativement facile d'estimer la valeur de K à partir des équations décrivant l'évolution de la distance entre deux points infiniment voisins. Pour ce faire, nous allons maintenant introduire la fonction de corrélation $C(d, \epsilon)$ avec $d \in \mathbb{Z}^+$ et $d \ll N$ donnée par :

$$C(d, \epsilon) = \frac{2}{(N-d)(N-d-1)} \sum_{j=1}^{N-d} \sum_{i=j+1}^{N-d} H(\epsilon - r_{ij}(d)) \quad (3.13)$$

où la valeur de $r_{ij}(d)$ est donnée par (Grassberger et Procaccia, 1983b) :

$$r_{ij}(d) = \left(\sum_{k=0}^{d-1} \|X_{i+k} - X_{j+k}\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.14)$$

Ainsi, par définition, la valeur de K_1 , correspondant à l'entropie métrique, est donnée par :

$$K_1 = \frac{1}{\tau} \lim_{\substack{m \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \ln \frac{C(d, \epsilon)}{C(d+1, \epsilon)}. \quad (3.15)$$

En pratique, cette limite est calculée en traçant $\ln C(d, \epsilon)$ en fonction de $\ln(\epsilon)$ pour une série de valeurs de dimensions d croissantes. Une série de droites avec une pente ν est obtenue avec un déplacement de $\exp(-d\tau K_1)$, où τ est le temps de séparation entre les points (typiquement le pas de temps). Cette méthode est présentée en détail dans (Grassberger et Procaccia, 1983b) et appliquée sur des systèmes réels dans (Cassanello et al., 1995). En pratique, la valeur de d ne devrait pas être trop grande afin d'éviter de dégrader les résultats en raison de la dispersion des données (Sprott, 2003). L'entropie K_1 (Eq. 3.12) est une borne inférieure pour la somme des exposants de Lyapunov positifs.

3.5.4 Sections de Poincaré

Les travaux qui ont touché la caractérisation des sections de Poincaré en mélange granulaire proviennent essentiellement de Ottino et collaborateurs. Il s'agit d'une ex-

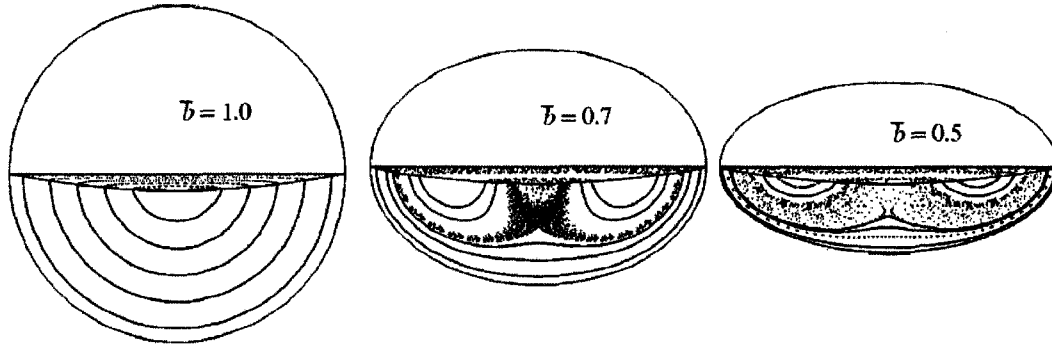


FIG. 3.3 – Différentes sections de Poincaré pour géométries avec différentes excentricités. Tiré de Khakhar *et al.* 1999.

tension des travaux entrepris dans le domaine du mélange chaotique de fluides (Otino, 1989). En supposant que le système dynamique est déterministe, il existe une règle qui régit la dynamique, bien qu'elle puisse être complexe et non linéaire.

Définition 3.7. Soit $\{z_1, z_2, \dots, z_n\}$ un ensemble d'intersections de trajectoires avec une surface transversale Γ . L'application de Poincaré est l'application $\wp : \Gamma \rightarrow \Gamma$ telle que $z_{n+1} = \wp(z_n)$.

Une discussion détaillée sur le choix approprié de la section Γ est présentée dans (Sprott, 2003; Wiggins, 1992, 1990). Cette méthode permet d'étudier le système dynamique en lui retirant une dimension. Dans le cas d'un écoulement périodique, il est naturel de prendre une section à une période constante afin de générer une projection stroboscopique. Ceci représente ce qui serait vu si une lampe stroboscopique synchronisée illuminait la trajectoire à la fréquence voulue. Un exemple typique est présenté à la Fig. 3.3 où la section de Poincaré est calculée pour différentes géométries.

3.6 Vérification de l'implantation

Dans cette section nous allons appliquer les méthodes numériques proposées afin de calculer les propriétés d'attracteurs étranges connus. Pour ce faire, nous allons étudier les attracteurs simples (Logistic map, Henon map, Tinkerball map, Burger's map) de même que des attracteurs de systèmes différentiels dissipatifs relativement plus complexes dont l'oscillateur de van der Pol, l'attracteur de Lorentz et l'attracteur de Rössler.

3.6.1 Présentation des systèmes étudiés

Nous allons ici introduire les attracteurs qui feront l'objet de l'étude en utilisant l'approche introduite dans les sections précédentes. Ces systèmes sont tirés de Sprott (2003). La figure 3.4 présente la structure des attracteurs de Lorentz et de Rössler.

TAB. 3.1 – Systèmes chaotiques étudiés

Système	Équations	Conditions initiales
Transformation logistique	$X_{n+1} = AX_n(1 - X_n)$	$A = 4$ et $X_0 = 0.1$.
Transformation de Henon	$X_{n+1} = 1 - aX_n^2 + bY_n$ $Y_{n+1} = X_n$	$a = 1.4, b = 0.3$ $X_0 = 0$ et $Y_0 = 0.9$.
Lorentz	$\dot{x} = \sigma(y - x)$ $\dot{y} = -xz + rx - y$ $\dot{z} = xy - bz$	$\sigma = 10, r = 28, b = 8/3$ $x_0 = 0, y_0 = -0.01$ $z_0 = 9$
Rössler	$\dot{x} = -y - z$ $\dot{y} = x + ay$ $\dot{z} = b + z(x - c)$	$a = b = 0.2, c = 5.7$ $x_0 = -9, y_0 = 0$ $z_0 = 0$

Suite à la page suivante

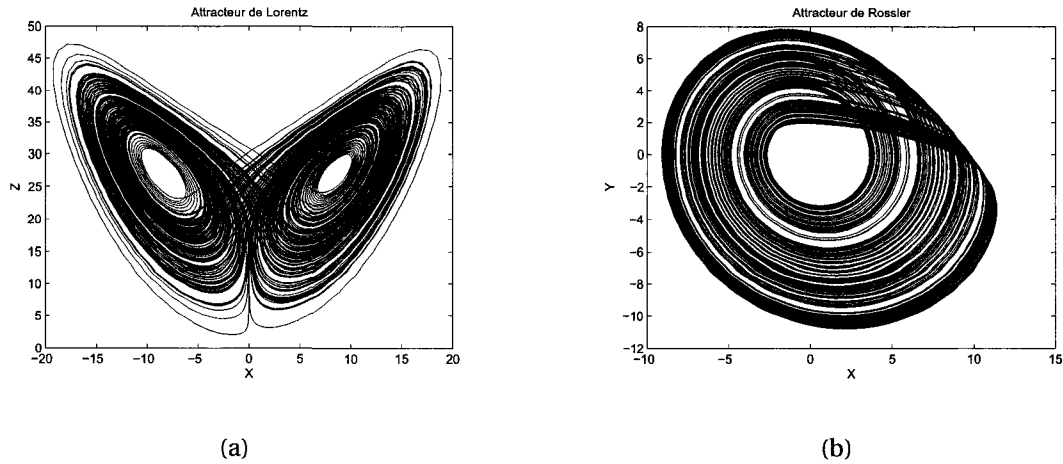


FIG. 3.4 – Exemple de deux attracteurs faisant l’objet de la validation. (a) Une projection dans le plan $x - y$ de l’attracteur de Lorentz. (b) Une projection dans le plan $x - z$ de l’attracteur de Rössler.

3.6.2 Dimension de l’attracteur

Dans un premier temps, nous allons calculer la dimension des attracteurs à l’aide de l’Eq. 3.7. Un exemple de la relation entre la dimension ϵ et la fonction de corrélation $C(\epsilon)$ est présenté à la figure 3.5. La pente de la droite de régression est calculée et les résultats sont présentés au tableau 3.2. Nos essais ont été faits avec 1 000 000 de points. Pour les systèmes dynamiques (i.e. Lorenz et Rössler), nous avons échantillonné à intervalles de 0.01 et 0.001 seconde respectivement. Les résultats obtenus concordent bien avec les résultats obtenus par Sprott (2003) et ceci permet de vérifier notre implantation pour le calcul de la dimension fractale de l’attracteur.

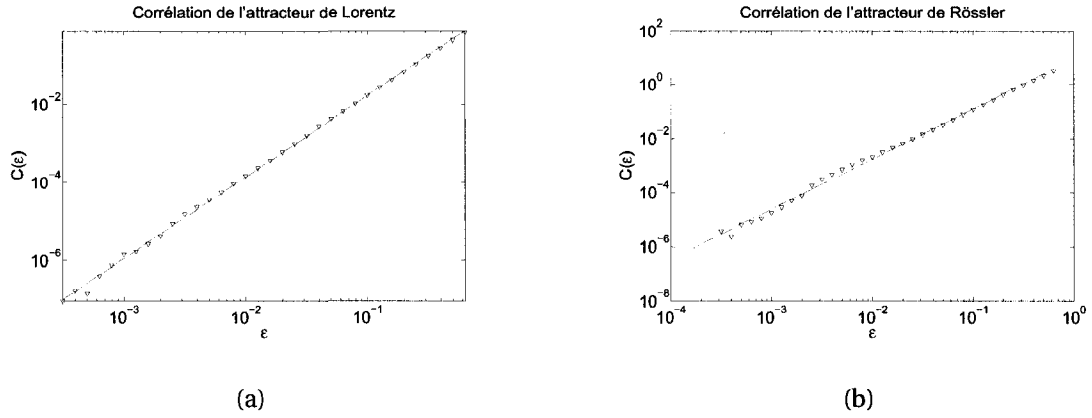


FIG. 3.5 – Fonction de corrélation en fonction de la dimension ϵ . (a) Les résultats obtenus pour l'attracteur de Lorentz et (b) les résultats pour l'attracteur de Rössler. La tendance log-linéaire est clairement observée.

3.6.3 Indice de Lyapunov maximal

Nous allons maintenant appliquer les Eqs. 3.10 et 3.11 sur les mêmes séries de données obtenues en 3.6.2. Pour le Henon map, nous allons employer un plongement de dimension $m = 2$ tel que suggéré par Sprott (2003); Rosenstein et al. (1993). Dans le cas des autres attracteurs de dimension supérieure (i.e. Lorentz et Rössler), nous allons utiliser un plongement de dimension $m = 3$. La période choisie est $J = 1$ tel que discuté aussi par Rosenstein et al. (1993). La valeur de J qui permet de minimiser l'erreur avec la véritable valeur est celle qui permet de diminuer la valeur de la fonction d'autocorrélation d'un facteur $1 - 1/e$. Ce résultat, bien qu'empirique, a été vérifié par Rosenstein et al. (1993) dans le cas des attracteurs qui nous intéressent. Les résultats obtenus sont résumés au tableau 3.3. Un exemple de la courbe obtenue de $L_k(k)$ est présenté à la figure 3.6. On y voit clairement la relation linéaire. De plus, la pente de cette droite est la valeur de l'indice de Lyapunov maximal. Une discussion complète au sujet du choix de la dimension de plongement m ainsi que sur le nombre de points

TAB. 3.2 – Dimensions des attracteurs obtenus par notre implantation et comparaison avec la littérature

Attracteur	Ce travail				Sprott				Erreur (%)
	ν	N	m	J	ν	N	m	J	
Logistic	0.9536	1×10^6	1	1	1.0 (exact)	4 157 923	1	1	4.6
Henon	1.212	1×10^6	2	1	1.220 ± 0.036	3 337 922	2	1	0.65
Lorentz	2.092	1×10^6	3	1	2.068 ± 0.086	2 678 976	3	1	1.2
Rössler	1.855	1×10^6	3	1	1.991 ± 0.065	3 196 115	3	1	6.8

requis est présentée dans Rosenstein et al. (1993).

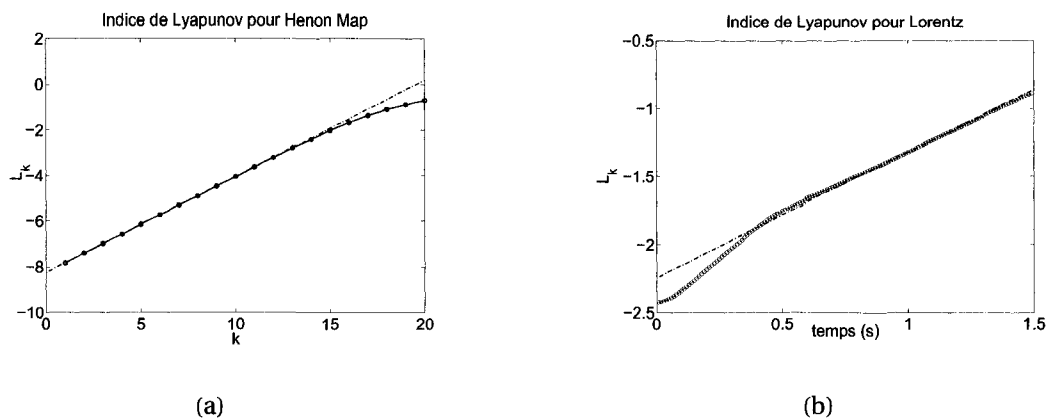


FIG. 3.6 – Courbe de $L_k(k)$ en fonction de k . La pente de la droite est la valeur de l'indice de Lyapunov maximal λ_1 . (a) Pour l'attracteur de Henon, (b) pour l'attracteur de Lorentz.

3.6.4 Entropie

De manière similaire, nous allons appliquer la méthode de Grassberger et Procaccia (1983b) sur le Henon map afin de valider les résultats obtenus (les conditions d'analyse sont les mêmes, i.e. $m = 2$ et $J = 1$). Un exemple de la courbe obtenue pour

TAB. 3.3 – Indices de Lyapunov maximaux

Attracteur	Ce travail		Sprott		Variation (%)
	λ_1	N	λ_1	N	
Logistic Map	0.693	3.2×10^4	$\ln 2$	(exact)	0.02
Henon Map	0.42	3.2×10^4	0.42	3.2×10^4	0.0
Lorentz	0.882	5.0×10^4	0.9056	1.0×10^6	3.0

TAB. 3.4 – Entropie métrique pour différents attracteurs

Attracteur	Ce travail		(Grassberger et Procaccia, 1983b)		Variation (%)
	K_1	N	K_1	N	
Henon Map	0.338	15 000	0.325 ± 0.02	15 000	4.0%

différentes valeurs de d est présenté à la Fig. 3.7. Le tableau 3.4 présente les résultats obtenus et ceux de la littérature.

3.7 Application à deux systèmes de mélange à retournement

Afin de montrer l'intérêt de l'approche proposée, nous considérons deux systèmes complètement différents, un mélangeur en V de 16 quarts (50% de remplissage v/v) et un mélangeur cylindrique (diamètre interne de 29 cm, longueur de 29 cm. avec 20% de remplissage v/v). La raison du choix de ces deux systèmes est que dans le premier cas (mélangeur en V), une périodicité temporelle apparaît dans l'écoulement dû à l'asymétrie angulaire de la géométrie, alors que dans le cas du cylindre, l'écoulement est stationnaire et contient environ deux dimensions actives (Ottino, 1989; Khakhar et al., 1999). Le matériel utilisé consiste en des billes de verre (3 mm de diamètre) dans le

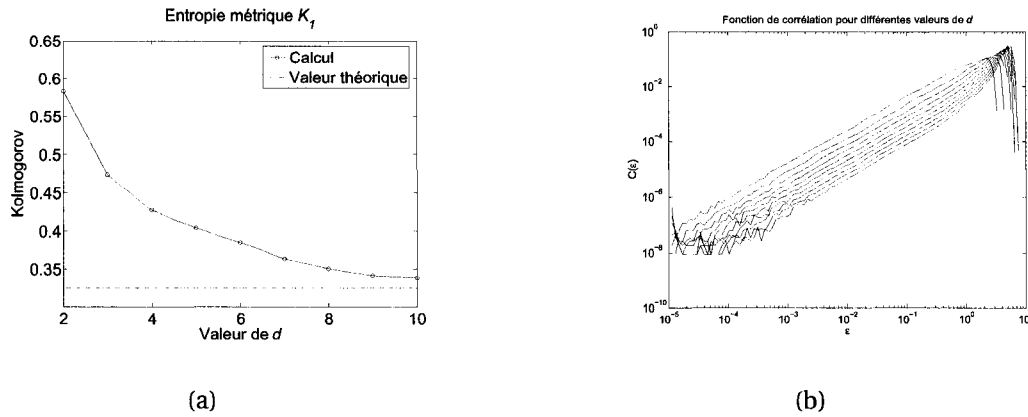


FIG. 3.7 – (a) Entropie de Kolmogorov calculée à différentes valeurs de d . (b) Valeur de la fonction de corrélation pour différentes valeurs de d .

mélangeur en V et de particules de lactose-avicel ($d_{50}=780 \mu\text{m}$) dans le cylindre. La granulométrie du lactose-avicel a été analysée avec un analyseur de tailles de particules Sympatec et les résultats sont présentés à la figure 3.8.

3.8 Résultats et discussion

La dimension de l'attracteur caractérisant l'écoulement des particules dans le mélangeur en V et dans le mélangeur cylindrique est d'abord calculée en utilisant l'équation 3.7. Le graphique de la fonction de corrélation pour différentes valeurs de ϵ est ensuite présenté à la figure 3.9. Ces fonctions de corrélation sont calculées en utilisant $N = 1\,283\,000$ points et un délai $J = 1$. Des valeurs différentes de J n'ont pas semblé affecter les résultats obtenus. La période d'échantillonnage du signal est de 7 ms. Tel que montré au tableau 3.5, une pente de 3.78 et 2.82, associée au mélangeur en V et au mélangeur cylindrique respectivement, est obtenue avec $m = 15$ lorsque ϵ tend vers 0, i.e. dans la région où $\epsilon \leq 0.1$. Cette pente semble converger vers une asymptote pour des valeurs croissantes de m , tel qu'attendu par la littérature. La présence de deux

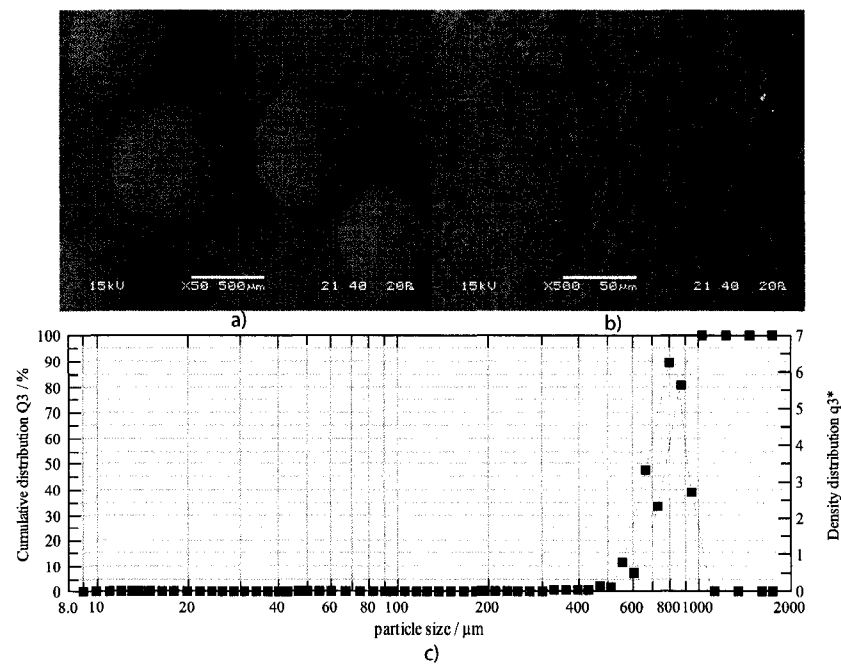


FIG. 3.8 – Clichés microscopiques (SEM) des particules sphéronisées lactose-avicel utilisées dans le cylindre. a) 50X, b) 500X, c) Distribution granulométrique des particules utilisées.

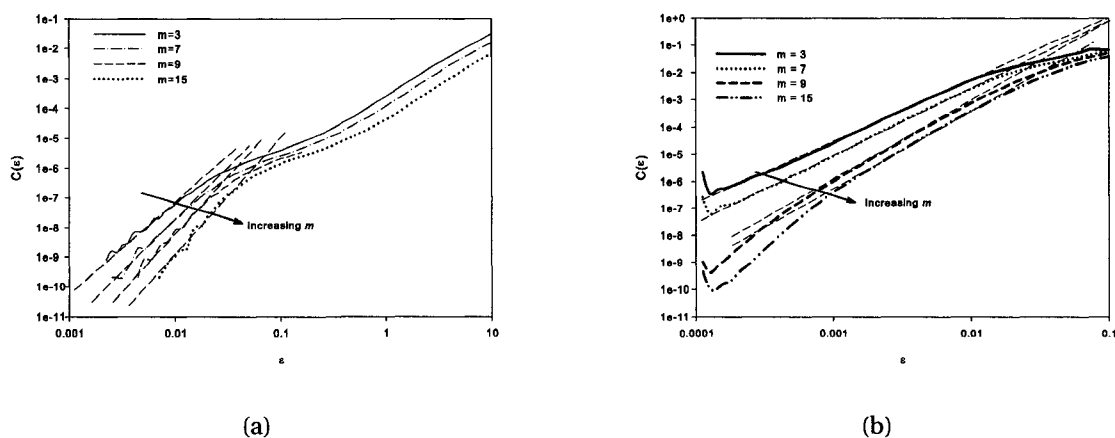
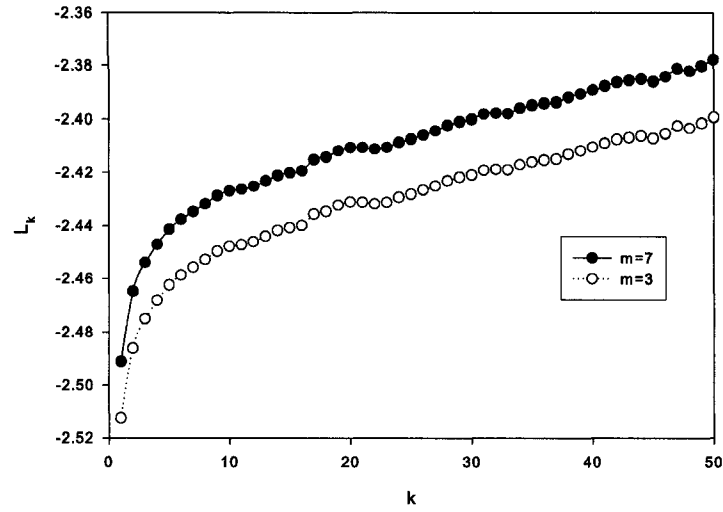


FIG. 3.9 – Fonction de corrélation pour différentes valeurs de ϵ montrant un comportement log-linéaire pour différentes valeurs de m dans a) le mélangeur en V et b) le cylindre.

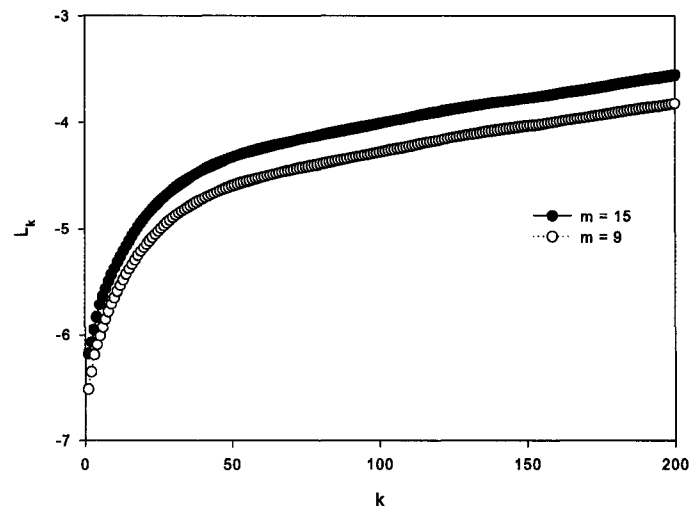
TAB. 3.5 – Valeurs de ν pour des valeurs croissantes de m .

m	ν (mélangeur en V 10RPM)	ν (Cylindre 20RPM)
3	2.77	2.22
7	3.34	2.37
9	3.73	2.75
15	3.78	2.82

plateaux dans le cas du mélangeur en V peut être attribué à l'existence de deux attracteurs. Le tableau 3.5 présente les valeurs de ν pour des valeurs croissantes de m . Une valeur non entière de ν suggère la présence de mélange chaotique. Néanmoins, ce critère issu de la théorie est difficile à interpréter en pratique puisque la mesure contient probablement une incertitude ainsi qu'un bruit difficile à identifier. La présence de chaos sera, à ce titre, davantage mise en évidence par le calcul de l'indice de Lyapunov.



(a)



(b)

FIG. 3.10 – Évolution de L_k pour des valeurs croissantes de k avec deux valeurs de m pour a) le mélangeur en V et b) le cylindre. L'indice de Lyapunov est donné par la pente de la partie linéaire de la courbe.

Le graphe de L_k en fonction de k pour le mélangeur en V et le cylindre est présenté à la figure 3.10. La présence d'une zone linéaire est une signature du chaos, signifiant que la distance entre les trajectoires dans l'espace à dimension m croît de façon exponentielle (Sprott, 2003). La valeur de l'exposant de Lyapunov maximal dans les deux cas est de $0.16s^{-1}$ et $0.47s^{-1}$ pour le mélangeur en V et le cylindre respectivement. Des valeurs inférieures de cet indice dans le cas du mélangeur en V peuvent s'expliquer par la différence dans le niveau de remplissage, la littérature s'entendant sur le fait qu'un niveau de remplissage plus élevé augmente significativement le temps de mélange dans ce type de géométrie (Lemieux et al., 2007). Des valeurs positives confirment que l'écoulement présente des structures chaotiques. De plus, à partir de la figure 3.10, il est possible d'observer que la valeur de l'indice de Lyapunov maximal est indépendante de la dimension m , tel que prévu par Sprott (2003).

3.9 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté les différents outils empruntés de l'analyse des systèmes dynamiques pour déterminer des propriétés de mélange de systèmes particuliers dans des géométries spécifiques. Une vérification de notre implantation a d'abord été effectuée sur des systèmes dont les paramètres sont documentés. Nous avons ensuite utilisé ces outils sur les mesures non intrusives obtenues par la méthode développée au chapitre 2 (RPT). En particulier, deux systèmes modèles, soit le mélangeur en V et le mélangeur cylindrique, ont été étudiés avec cette approche, permettant de mettre en lumière les capacités de notre approche expérimentale sur des systèmes à quelques dimensions (e.g. le mélangeur cylindrique) et sur des systèmes à plus de trois dimensions (e.g. le mélangeur en V). Les résultats obtenus confirment que cette

approche puissante d'analyse des écoulements peut être utilisée pour quantifier l'effet de plusieurs paramètres d'opération sur les performances des équipements étudiés.

Il est néanmoins difficile de ramener les résultats obtenus à partir des métriques définies par l'analyse du chaos à des valeurs plus communes de mélange tel que l'écart-type relatif (RSD) et la covariance en fluide (COV), qui permet de quantifier la distribution de mélange par rapport à une concentration par exemple. Ou encore, il est difficile de déterminer s'il existe des axes spécifiques le long desquels le mélange est plus performant que d'autres. Autrement dit, l'information obtenue à partir de l'analyse présentée ici est le reflet de ce qui se passe localement dans le système et ne reflète que très peu ce qui se passe à une autre échelle de caractérisation. C'est pourquoi le chapitre suivant s'attarde à cette question en permettant de définir, à partir de mesures locales issues de la RPT, une métrique invariante de mélange qui caractérise l'homogénéité du mélange des particules dans un espace quelconque, ainsi que les axes principaux de transport.

Chapitre 4

Définition d'une mesure pour le mélange granulaire

4.1 Contexte

[†]Une des questions centrales à ce moment de la thèse est de déterminer une approche permettant de quantifier le mélange en utilisant une mesure lagrangienne (ou locale) de l'écoulement. Ceci est motivé par le fait que nous avons une mesure locale des trajectoires d'une seule particule via l'utilisation de la RPT ou de solutions de modèles numériques (c.f. chapitre 2-3). L'hypothèse à la base de ce chapitre provient de l'observation suivante. Lorsqu'on définit un système comme étant mélangé, on le dit mélangé par rapport à la situation initiale et par rapport à la disposition spatiale des

[†]Ce chapitre a été soumis intégralement pour publication dans J. Doucet, F. Bertrand and J. Chaouki, *A measure of mixing from Lagrangian tracking using principal component analysis*, Chemical Engineering Research and Design. Transactions of the Institution of Chemical Engineers : Part A., Soumis.

composants. Par exemple, on verse des ingrédients dans une trémie, disons un cylindre pour l'instant, et l'objectif après l'opération de mélange est que les ingrédients soient uniformément répartis dans l'espace compris à l'intérieur de la trémie. Il y a donc un aspect important lié à l'espace. D'un point de vue théorique, ceci revient à mesurer la corrélation entre la position des particules dans l'espace et leur position à un autre moment, disons la situation initiale, dans le système.

Maintenant, reprenons l'exemple avec une trémie non symétrique. La différence avec le cas précédent est frappante. Supposons que la géométrie soit un cube avec des arêtes de longueur L . Regardons une tranche de ce cube dans le plan cartésien $x - y$. Nous aurons alors $-L/2 < x < L/2$ et de même pour $-L/2 < y < L/2$. Supposons que nous calculons la corrélation entre la position des particules dans cette zone avec leur position initiale dans cette même zone. Nous aurons alors des valeurs de x et y pour les particules qui seront comprises entre $-L/2$ et $L/2$. Maintenant, supposons que le système est soumis à une rotation de 45 degrés. Les valeurs possible de x et y sont maintenant différentes puisque $-\sqrt{3}/4L < x < \sqrt{3}/4L$ et de même pour y . Ainsi, de manière absolue, la corrélation mesurée à cet instant ne pourra pas être comparée à celle calculée au temps précédent puisque le référentiel introduit un biais. Le moyen de se sortir de cette impasse consiste à redéfinir le système de coordonnées pour toujours garder une mesure invariante. Cette approche fait l'objet du présent chapitre.

Les approches généralement employées pour la quantification du mélange reposent sur des méthodes expérimentales basées sur les statistiques spatiales. L'état d'un système est dit mélangé lorsque, et nous le verrons plus tard dans ce chapitre, la variance d'une distribution de concentrations parmi les échantillons prélevés tend vers zéro. Parmi les techniques disponibles pour faire ce genre d'analyse, on peut noter les méthodes utilisant des traceurs colorés. Dans ce genre d'applications, les teintures sont

généralement sensibles au changement de pH de sorte qu'un petit volume de solution, pour lequel le pH a été abaissé, est introduit dans un système à l'aide d'une seringue. Pendant que le traceur se disperse et se distribue dans le système, la couleur de la solution change et l'intensité de la coloration se relie à la concentration du traceur dans différentes régions du système (Delaplace et al., 2004; Cabaret et al., 2007). D'autres techniques existent basées sur la fluorescence (Pineault et Cloutier, 1972), la thermographie (Lee et Yianneskis, 1997) ou différentes techniques tomographiques, telles que colligées dans l'article de Chaouki et al. (1997).

Dans les systèmes opaques, dont les systèmes granulaires font partie, les méthodes basées sur l'analyse optique ne peuvent pas être appliquées directement, simplement parce que le système ne peut être observé au-delà de quelques millimètres de la paroi transparente (généralement faite de plastique ou de verre). Pour palier à cette difficulté, particulièrement dans les systèmes solide-solide, le mélange est échantillonné et la variance de la concentration de chacune des phases dans les échantillons est calculée et prise pour une mesure de mélange (Moakher et al., 2000; Lemieux et al., 2006, 2007). Cette approche répandue a de nombreux détracteurs. D'abord, durant l'échantillonnage, le système est perturbé plus ou moins fortement, selon le type d'échantillonneur utilisé, tel que discuté par Brone et al. (1998) et Muzzio et al. (2003). En fait, ceci est inhérent à toutes les méthodes intrusives de par leur nature. D'autre part, et c'est probablement le point majeur, cette mesure ne se relie à aucune dimension spatiale, de sorte qu'il n'est pas possible de déterminer, par exemple, des directions principales de mélange.

Les limitations liées aux approches d'échantillonnage ont mené au développement de nombreuses méthodes non-intrusives basées sur le suivi lagrangien de particules marquées. Ces techniques sont dites lagrangiennes au sens où elles fournissent

les trajectoires suivies par un (ou plusieurs) traceur en écoulement dans le système. Plusieurs méthodes expérimentales lagrangiennes existent telle que la PIV (*particle image velocimetry*) qui s'applique généralement aux surfaces en écoulement puisque reliée à du traitement optique d'image. Il y a aussi des approches utilisant le radiomarkage dont la PEPT (*positron emission particle tracking*) et la RPT (*radioactive particle tracking*).

Plusieurs techniques existent pour quantifier le mélange dont celles liées au chaos et à la turbulence lagrangienne (Ottino, 1989; Meier et al., 2007). Ces approches, bien que locales, permettent de mettre en évidence de nombreuses structures inhérentes au mélange dont les étirements, le nombre de dimensions, l'entropie et la présence d'instabilités dont certains points homocliniques et hétérocliniques. Toutefois, et c'est leur limite principale, ces approches ne permettent pas généralement de générer des courbes de mélange typiques permettant de déterminer un temps de mélange, dû au fait qu'elles étudient la dynamique de mélange à des échelles différentes (à la fois temporelles et spatiales).

Ce chapitre présente une approche simple qui permet d'obtenir une mesure invariante de mélange basée sur des mesures lagrangiennes de l'écoulement. En particulier, nous allons montrer qu'il est possible d'extraire les composantes principales du mélange. Ces composantes permettent ensuite de déterminer les directions le long desquelles le mélange est plus rapide et plus lent, en plus d'obtenir une borne supérieure de la courbe de mélange. Cette borne équivaut à mesurer le niveau de mélange dans la pire direction.

4.2 Mesures de mélange

Les définitions classiques développées en mélange de fluides font généralement appel au concept d'homogénéité d'un champ de concentration dans un certain espace R (Wiggins et Ottino, 2004). En effet, considérons une transformation lisse S qui caractérise le mélange dans R . On suppose que S préserve la mesure tel que pour tout $A \subset R$, on a $\mu(A) = \mu(S(A))$. Considérons une sous-région $B \subset R$ qui contient un traceur coloré pour lequel le volume est donné par la mesure $\mu(B)$. En posant que la fraction f_W est le nombre de points dans W , le nombre de traceurs originalement dans B qui se retrouvent dans une seconde région $W \subset R$ après n applications de la transformation S est donné par $\mu(S^n(B) \cap W)$. Ceci représente donc le nombre de points qui étaient dans B et qui ont été advectés par $S : B \mapsto R$ mais qui se retrouvent dans la sous région W . La fraction f_W à cet instant est alors donnée par :

$$f_W = \frac{\mu(S^n(B) \cap W)}{\mu(W)}. \quad (4.1)$$

et, à la limite, nous aurons

$$f_W = \frac{\mu(S^n(B) \cap W)}{\mu(W)} \rightarrow \frac{\mu(B)}{\mu(R)} = \mu(B). \quad (4.2)$$

en posant que $\mu(R) = 1$. On a par définition

$$\mu(B) = \int f_B d\mu \quad (4.3)$$

$$\mu(W) = \int f_W d\mu \quad (4.4)$$

Ainsi, en partant de l'expression 4.2, on obtient

$$\int f_{S^n(B) \cap W} d\mu - \int f_B d\mu \int f_W d\mu \rightarrow 0 \quad (4.5)$$

lorsque $n \rightarrow \infty$.

Parmi les approches traditionnelles de caractérisation du mélange, il est commun de suivre l'évolution de la corrélation d'un champ scalaire de concentration en utilisant une certaine fonction de corrélation. Ainsi, de manière plus générale, pour une classe d'observables (e.g. concentration, vitesse, positions) f et g , la fonction de corrélation à l'itération n , notée $C_n(f, g)$ est donnée par :

$$C_n(f, g) = \int g(f \circ S^{-n}) d\mu - \int g d\mu \int f d\mu, \quad (4.6)$$

qui fournit une mesure du taux de décroissance d'une classe d'observables dans le système. En particulier, on peut penser au cas où $f \equiv f_B$ représente le nombre de points qui sont dans un sous-espace quelconque $B \subset R$ et $g \equiv f_W$ représente le nombre de points dans une sous-région $W \subset R$. En supposant que les traceurs sont tous initialement dans B , à la limite, si le système est ergodique[†], on peut s'attendre à ce que, si le système est mélangé, alors la concentration est la même pour tout $W \subset R$ et est égale au rapport du volume de B sur le volume de R . Ainsi, en suivant Wiggins et Ottino (2004) à la limite nous aurons $C_n(f, g) = 0$ en vertu de Eq. 4.5.

En lien avec cette définition générale, Danckwerts (1952) a introduit l'intensité de ségrégation I qui est une mesure de la variance de la concentration d'une espèce B dans une autre espèce pure A (Paul et al., 2003). En pratique, puisqu'il est difficile d'obtenir une mesure de la concentration en chacun des points de R , plusieurs échantillons sont sous-tirés de R et on calcule cette variance en prenant une somme qui s'écrit sous la forme de l'estimateur non-biaisé de l'indice de ségrégation :

$$I = \frac{1}{N-1} \sqrt{\frac{\sum_p^N (C_p - \bar{C})^2}{\bar{C}(1 - \bar{C})}} \quad (4.7)$$

où C_p est la concentration dans l'échantillon p , \bar{C} est la moyenne de concentration et N est le nombre d'échantillons. De récents travaux ont introduit de nombreuses

[†]qui est une condition nécessaire, mais non suffisante pour avoir du mélange

méthodes pour le calcul de cet indice de ségrégation. Par exemple Cleary et al. (1998) et Metcalfe et al. (1995), calculent le centroïde normalisé d'une distribution de couleur de plusieurs traceurs. Le système est dit mélangé lorsque le centroïde de chacune des distributions coïncide. D'une manière similaire, Asmar et al. (2002) introduit un indice généralisé dans un lit vibrant qui correspond à la moyenne de la coordonnée axiale des centres de particules d'un type particulier divisée par la moyenne de cette coordonnée calculée sur toutes les particules.

Parmi les mesures disponibles de mélange à l'échelle macroscopique, dont l'indice de ségrégation est le principal utilisé, plusieurs caractéristiques peuvent rapidement devenir limitantes :

1. Invariance du référentiel : une mesure de mélange devrait être indépendante du référentiel utilisé pour représenter le système. Le système devrait être regardé d'un point de vue tel que le système semble toujours le mieux (ou le pire) en terme de mélange. En particulier, il devrait aussi être invariant sous rotation, translation, symétrie et homothétie.
2. Invariance de la taille d'échantillon : le calcul de l'indice de ségrégation I dépend du nombre d'échantillons prélevés N ainsi que le nombre de traceurs dans chacun des échantillons. Un résultat connu est que le comportement asymptotique de l'intensité de ségrégation dépend du nombre de particules dans l'échantillon (Lemieux et al., 2006).
3. Observable lié à l'espace : l'observable considéré pour quantifier le mélange devrait tenir compte d'une façon ou d'une autre de la position des traceurs dans l'espace afin de pouvoir déterminer des directions de corrélation et identifier des axes principaux de mélange.
4. Observable lié aux propriétés : le mélange doit pouvoir être quantifié par rapport

à certaines propriétés dont la couleur, la température, la taille des traceurs, etc. Par exemple, dans le cas des systèmes granulaires polydisperses, le mélange par rapport à la taille ou la densité des particules est d'un intérêt certain.

5. Bornes : la mesure doit être bornée supérieurement et inférieurement.

4.3 Définition de mélange

Nous allons ici introduire notre définition de mélange que nous réutiliserons dans le cadre de cette thèse. Considérons que la position d'une particule j à un certain temps t est donnée par le vecteur $\mathbf{x}^t(j) = (x_1^t(j), x_2^t(j), x_3^t(j))$ et que sa position initiale (i.e. à $t = 0$) est donnée par $\mathbf{x}_0(j) = (x_1^0(j), x_2^0(j), x_3^0(j))$. Une particule j suit donc une trajectoire lisse $\{x^t(j)\}_{t \geq 0}$. Nous allons alors introduire la définition suivante :

Définition 4.1. *Soit une mesure de probabilité \mathcal{P} et un espace mesurable $R \subset \mathbb{R}^3$. Soit $\mathbf{x}^t(i) \in R$ et $\mathbf{x}^0(i) \in R$ la position d'une particule i au temps t et au temps initial respectivement. Alors le système est dit mélangé au sens restreint si pour tout $i = 1, \dots, N$:*

$$\mathcal{P}\{\mathbf{x}^t(i) | \mathbf{x}^0(i)\} = \mathcal{P}\{\mathbf{x}^t(i)\}. \quad (4.8)$$

Cette définition stipule que le mélange est établi par rapport à une classe d'observables liés au champ \mathbf{x}^t , i.e. la distribution initiale des particules dans le système. En fait, si des particules sont distribuées d'une certaine façon au départ, on s'attend, après l'opération de mélange, que toutes les particules soient complètement délocalisées, de manière à ce qu'il n'y ait aucune corrélation entre leur position originale et leur position finale. Néanmoins, il ne s'agit pas d'un mélange aléatoire au sens large, i.e. par rapport à toutes les caractéristiques des particules. En effet, il se peut que les particules soient mélangées au sens restreint, mais qu'elles s'organisent par rapport

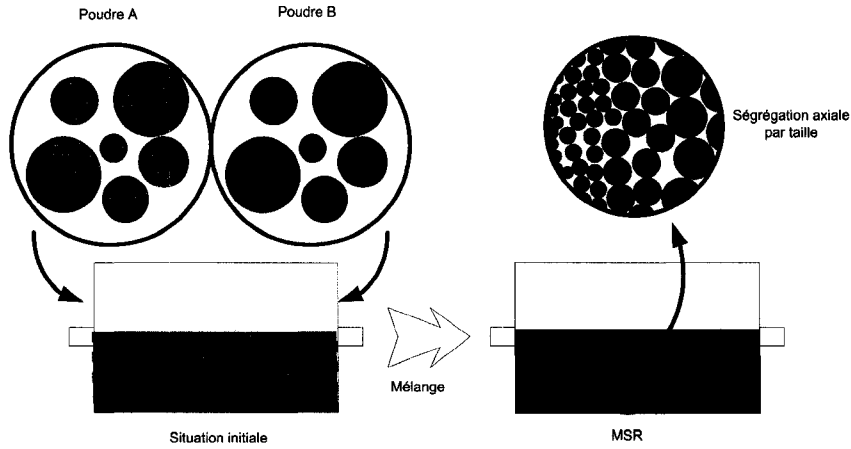


FIG. 4.1 – Les particules se retrouvent mélangées par rapport à la couleur mais s’organisent en fonction de leur taille (mélange au sens restreint. Chaque classe de particules se déplace dans des zones précises en fonction de leur taille.

à leur taille (e.g. mécanismes de ségrégation). Il existera alors une forte corrélation entre la taille et la position des particules (voir figure 4.1). Pour éviter la confusion, nous allons introduire une autre définition plus large introduisant une seconde classe d’observables.

Définition 4.2. Soit une mesure de probabilité \mathcal{P} sur un espace mesurable R et $\mathcal{U} = \{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ l’ensemble des propriétés des particules tel que $u_k(q)$ représente la k -ième propriété de la particule $q \in V$. Un système est dit aléatoirement mélangé au sens large si pour tout $i = 1, \dots, N$ et $\mathbf{x} \in R$:

$$\mathcal{P}\{\mathbf{x}^t(i) | \mathbf{x}^0(i), u_1(i), u_2(i), \dots, u_n(i)\} = \mathcal{P}\{\mathbf{x}^t(i)\}. \quad (4.9)$$

On remarque alors que si l’équation 4.9 est non vérifiée, on retrouve la condition de mélange au sens restreint.

4.4 Développement de la mesure

Le problème vise à trouver la direction α qui nous retourne le coefficient de corrélation maximal entre le champ \mathbf{x}^t et la distribution initiale \mathbf{x}^0 . Autrement dit, on cherche la direction α selon laquelle il faut *regarder* le système pour voir le plus de corrélation entre la position initiale des particules et leur position au temps t . Il s'agit donc de tourner le système de manière à toujours le regarder dans la même direction. Ceci permettra de rendre la métrique invariante sous des transformations qui ne mélangent pas (e.g. rotation, translation, homothétie, symétrie). Pour ce faire, nous notons $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ le vecteur unitaire le long de cette direction.

4.4.1 Cas du mélange au sens restreint (MSR)

Considérons d'abord le cas de mélange au sens restreint. Introduisons la notation suivante :

$$E[\mathbf{x}_l^t] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_l^t(i), \quad (4.10)$$

$$\sigma_{\mathbf{x}_l^t}^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N x_l^t(i) - E[\mathbf{x}_l^t]^2, \quad (4.11)$$

qui représente l'espérance (moyenne) et l'estimateur non-biaisé de la variance de la l -ième composante de la position des N traceurs dans le système au temps t respectivement. Introduisons maintenant

$$\mathbf{X}^t = \begin{pmatrix} \mathbf{X}^t(1) \\ \mathbf{X}^t(2) \\ \vdots \\ \mathbf{X}^t(N) \end{pmatrix} = (\mathbf{X}_1^t, \mathbf{X}_2^t, \mathbf{X}_3^t) = \begin{pmatrix} X_1^t(1) & X_2^t(1) & X_3^t(1) \\ X_1^t(2) & X_2^t(2) & X_3^t(2) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ X_1^t(N) & X_2^t(N) & X_3^t(N) \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

où

$$X_l^t(i) = \frac{1}{\sigma_{x_l^t}} (x_l^t(i) - E[\mathbf{x}_l^t]) \quad (4.13)$$

pour $i = 1, 2, \dots, N$ et $l = 1, 2, 3$. Le terme de l'Eq. 4.13 a une moyenne nulle et une variance de 1. La composante principale de $\mathbf{X}^t(i)$ au temps t est alors donnée par

$$\Lambda^t(i) = \mathbf{X}^t(i) \boldsymbol{\alpha}^T, \quad (4.14)$$

qui permet de calculer le vecteur de corrélation

$$\mathbf{G}_\alpha^t = (\rho(\Lambda^t, \mathbf{X}_1^0), \rho(\Lambda^t, \mathbf{X}_2^0), \rho(\Lambda^t, \mathbf{X}_3^0)), \quad (4.15)$$

où

$$\rho(X, Y) = \frac{1}{\sigma_X \sigma_Y} E[(X - E[X])(Y - E[Y])] \quad (4.16)$$

dénote le coefficient de corrélation entre la variable X et Y . Le vecteur \mathbf{G}_α^t représente la corrélation entre la projection le long de $\boldsymbol{\alpha}$ de la position des particules au temps t et leur position initiale.

L'étape suivante consiste à trouver le vecteur unitaire $\boldsymbol{\alpha}$ tel que $\|\mathbf{G}_\alpha^t\|$ est maximal et introduire la mesure de mélange au sens restreint

$$\beta_{ws} = \sqrt{\frac{1}{3} \sup_{\boldsymbol{\alpha}} \|\mathbf{G}_\alpha^t\|^2}. \quad (4.17)$$

Si les composantes du champ sont indépendantes, i.e. si la dimension de l'écoulement est supérieure ou égale à la dimension $\dim(R)$, alors on peut montrer que $E[\Lambda^t] = 1$ et que $\sigma_{\Lambda^t} = 0$ par construction. Il s'ensuit alors que

$$\sum_{l=1}^3 \rho(\Lambda^t, \mathbf{X}_l^0)^2 = \sum_{l=1}^3 \left(\frac{1}{\sigma_{\Lambda^t} \sigma_{\mathbf{X}_l^0}} E[(\Lambda^t - E[\Lambda^t])(\mathbf{X}_l^0 - E[\mathbf{X}_l^0])] \right)^2$$

En utilisant le fait que $E[\Lambda^t] = 1$ et $\sigma_{\Lambda^t} = 0$, on trouve alors :

$$\begin{aligned}
 \|\mathbf{G}_\alpha^t\|^2 &= \sum_{l=1}^3 \rho(\Lambda^t, \mathbf{X}_l^0)^2 \\
 &= \sum_{l=1}^3 \left(\frac{1}{\sigma_{\Lambda^t} \sigma_{\mathbf{X}_l^0}} E[(\Lambda^t - E[\Lambda^t])(\mathbf{X}_l^0 - E[\mathbf{X}_l^0])] \right)^2 \\
 &= \sum_{l=1}^3 E[(\mathbf{X}^t \boldsymbol{\alpha}^T) \mathbf{X}_l^0] E[(\mathbf{X}^t \boldsymbol{\alpha}^T) \mathbf{X}_l^0] \\
 &= \sum_{l=1}^3 E \left[\left(\sum_{m=1}^3 \alpha_m \mathbf{X}_m^t \right) \mathbf{X}_l^0 \right] E \left[\left(\sum_{n=1}^3 \alpha_n \mathbf{X}_n^t \right) \mathbf{X}_l^0 \right] \\
 &= \sum_{l=1}^3 \sum_{m,n=1}^3 (\alpha_m \alpha_n E[\mathbf{X}_m^t \mathbf{X}_l^0] E[\mathbf{X}_n^t \mathbf{X}_l^0]),
 \end{aligned}$$

qui peut s'écrire sous la forme matricielle suivante

$$\|\mathbf{G}_\alpha^t\|^2 = \boldsymbol{\alpha} \mathbf{M} \boldsymbol{\alpha}^T, \quad (4.18)$$

où $\mathbf{M} = \mathbf{C} \mathbf{C}^T$, et

$$\mathbf{C}_{ij} = E[\mathbf{X}_i^t \mathbf{X}_j^0]. \quad (4.19)$$

L'équation 4.18 et l'indépendance des variables impliquent que \mathbf{M} est symétrique définie positive, ce qui implique que ses valeurs propres sont toutes réelles et positives. Le problème 4.17 vise à maximiser Eq. 4.18 sujet à la contrainte d'unicité $\|\boldsymbol{\alpha}\| = 1$. Ceci peut être fait en introduisant un multiplicateur de Lagrange λ , et en cherchant l'optimum du lagrangien associé

$$L(\boldsymbol{\alpha}, \lambda) = \boldsymbol{\alpha} \mathbf{M} \boldsymbol{\alpha}^T - \frac{\lambda}{2} (\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{\alpha}^T - 1). \quad (4.20)$$

Afin d'assurer un maximum, la solution de ce problème doit satisfaire

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\alpha}} = 0, \quad \frac{\partial^2 L}{\partial \boldsymbol{\alpha}^2} < 0, \quad (4.21)$$

ce qui mène au problème suivant

$$\boldsymbol{\alpha}\mathbf{M} - \lambda\boldsymbol{\alpha}^T = 0, \quad (4.22)$$

qui est un problème aux valeurs propres. Ceci signifie que λ est une valeur propre de \mathbf{M} et la question est de déterminer son vecteur propre associé qui correspond au vecteur recherché $\boldsymbol{\alpha}$. Si nous notons par $\mathcal{W} = \{\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \mathbf{w}_3\}$ l'ensemble des vecteurs propres unitaires de \mathbf{M} associés aux valeurs propres réelles $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 > 0$, puisque $\boldsymbol{\alpha} \in \mathcal{W}$:

$$\begin{aligned} \sup_{\boldsymbol{\alpha}} \|\mathbf{G}_{\boldsymbol{\alpha}}^t\|^2 &= \sup_{\boldsymbol{\alpha}} \boldsymbol{\alpha}\mathbf{M}\boldsymbol{\alpha}^T \\ &= \sup_{\ell} \mathbf{w}_{\ell}\mathbf{M}\mathbf{w}_{\ell}^T \\ &= \sup_{\ell} \lambda_{\ell} \mathbf{w}_{\ell}\mathbf{w}_{\ell}^T \\ &= \sup_{\ell} \lambda_{\ell} \|\mathbf{w}_{\ell}\|^2 \\ &= \lambda_1. \end{aligned}$$

Puisque $\lambda_1 > 0$, alors selon l'Eq. 4.20, en utilisant la condition de l'Eq. 4.21, l'optimum est un maximum de L . Conséquemment, la direction le long de laquelle la corrélation entre le champ \mathbf{x}^t et \mathbf{x}^0 est la plus forte est donnée par $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{w}_1$, et la valeur de l'indice de mélange au sens faible est donnée par

$$\beta_{ws} = \sqrt{\frac{\lambda_1}{3}}. \quad (4.23)$$

Cette valeur représente, par construction, une borne supérieure de la corrélation. Il est aussi possible de suivre l'évolution de la corrélation le long de directions définies comme, par exemple, les axes du référentiel cartésien, en choisissant $\boldsymbol{\alpha} = \vec{i}, \vec{j}$ ou \vec{k} . Ceci peut ainsi fournir de l'information sur les taux de mélange le long de ces axes.

4.4.2 Généralisation au cas du mélange au sens large (MSL)

Nous généralisons maintenant cette approche à une autre classe d'observables qui inclut cette fois un lien avec les propriétés des traceurs qui forment un ensemble $\mathcal{U} = \{u_1, u_2, \dots, u_n\}$. Toujours en posant, sans perte de généralité, la dimension du système à 3, nous posons les nouvelles variables liées aux propriétés

$$X_{3+k}^0(i) = \frac{1}{\sigma_{u_k}} (u_k(i) - E[u_k]), k = 1, 2, \dots, K, \quad (4.24)$$

et définissons la mesure de mélange au sens large par

$$\beta_{ss} = \sqrt{\frac{1}{3+K} \sup_{\alpha} \|\mathbf{G}_{\alpha}^t\|^2}, \quad (4.25)$$

où

$$\mathbf{G}_{\alpha}^t = (\rho(\Lambda^t, \mathbf{X}_1^0), \rho(\Lambda^t, \mathbf{X}_2^0), \rho(\Lambda^t, \mathbf{X}_3^0), \dots, \rho(\Lambda^t, \mathbf{X}_{3+K}^0)), \quad (4.26)$$

avec

$$\Lambda^t(i) = (\mathbf{X}_1^t, \mathbf{X}_2^t, \mathbf{X}_3^t) \cdot \boldsymbol{\alpha}^T. \quad (4.27)$$

Il est possible d'écrire $\|\mathbf{G}_{\alpha}^t\|$ de manière explicite tel que décrit pour la mesure de mélange au sens faible par

$$\begin{aligned} \|\mathbf{G}_{\alpha}^t\|^2 &= \sum_p \rho(\Lambda^t, \mathbf{X}_p^0)^2 \\ &= \sum_p \left(\frac{1}{\sigma_{\Lambda}^t \sigma_{\mathbf{X}_p^0}} E[(\Lambda^t - E[\Lambda^t])(\mathbf{X}_p^0 - E[\mathbf{X}_p^0])] \right)^2 \\ &= \sum_{p=1}^{3+K} E[(\mathbf{X}^t \boldsymbol{\alpha}^T) \mathbf{X}_p^0] E[(\mathbf{X}^t \boldsymbol{\alpha}^T) \mathbf{X}_p^0] \\ &= \sum_{p=1}^{3+K} E\left[\left(\sum_m \alpha_m \mathbf{X}_m^t\right) \mathbf{X}_p^0\right] E\left[\left(\sum_n \alpha_n \mathbf{X}_n^t\right) \mathbf{X}_p^0\right] \\ &= \sum_{p=1}^{3+K} \sum_{m,n=1}^3 \left(\alpha_m \alpha_n E[\mathbf{X}_m^t \mathbf{X}_p^0] E[\mathbf{X}_n^t \mathbf{X}_p^0] \right), \end{aligned}$$

à la différence que, dans ce cas-ci, $p = 1, \dots, 3 + K$ et $m, n = 1, \dots, 3$. Il en résulte alors que le problème peut s'écrire sous la forme matricielle (Eq. 4.18)

$$\|\mathbf{G}_\alpha^t\|^2 = \boldsymbol{\alpha} \mathbf{M} \boldsymbol{\alpha}^T,$$

avec $\mathbf{M} = \mathbf{C}\mathbf{C}^T$ et

$$\mathbf{C}_{ij} = E[\mathbf{X}_i^t \mathbf{X}_j^0] \quad (4.28)$$

pour $i = 1, \dots, 3$ et $j = 1, \dots, 3 + K$. La direction le long de laquelle la corrélation est maximale entre les positions $(\mathbf{X}_1^t, \mathbf{X}_2^t, \mathbf{X}_3^t)$ et l'ensemble des positions initiales et les propriétés $(\mathbf{X}_1^t, \mathbf{X}_2^t, \mathbf{X}_3^t, \dots, \mathbf{X}_{3+K}^0)$ est donnée par le vecteur propre associé à la valeur propre maximale de \mathbf{M} . La mesure de mélange au sens large est alors donnée par

$$\beta_{ss} = \sqrt{\frac{\lambda_1}{3 + K}}. \quad (4.29)$$

4.5 Application aux mélangeurs modèles

Afin de compléter le chapitre, nous proposons de revisiter les données expérimentales présentées dans la section 3.7 et de déterminer la valeur des métriques développées dans ce chapitre.

4.5.1 Mélange de particules monodisperses avec RPT

Afin d'illustrer l'approche proposée, nous appliquons la mesure de mélange au sens faible sur des données de RPT dans un mélangeur cylindrique (diamètre interne de 29cm et longueur de 29cm, 20% v/v de remplissage) et en V (16 qt. symétrique, 50% v/v de remplissage). La raison qui justifie ce choix est que le mélangeur en V présente une périodicité temporelle alors que le mélangeur cylindrique n'a qu'autour de 2 dimensions actives dans le système (Ottino, 1989; Khakhar et al., 1999). Le matériel

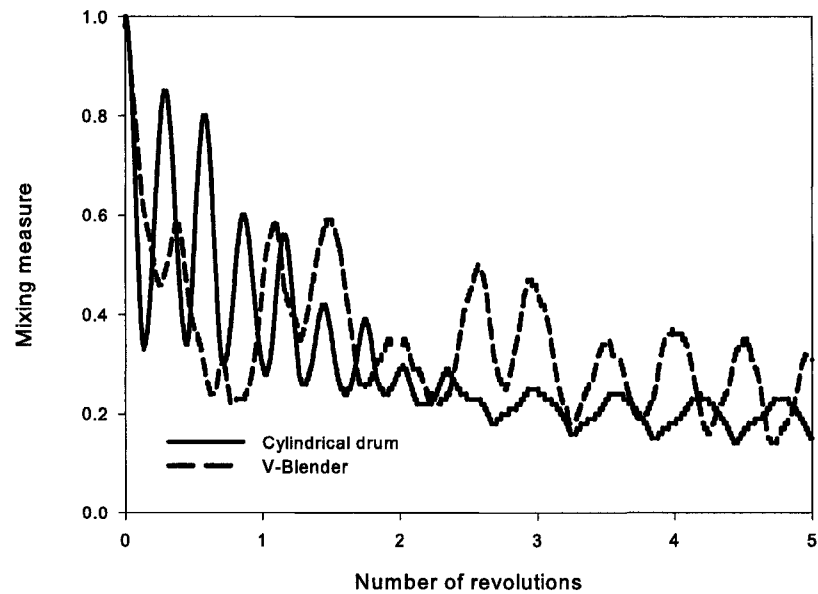


FIG. 4.2 – Évolution de la mesure de mélange β dans le mélangeur en V et dans le mélangeur cylindrique.

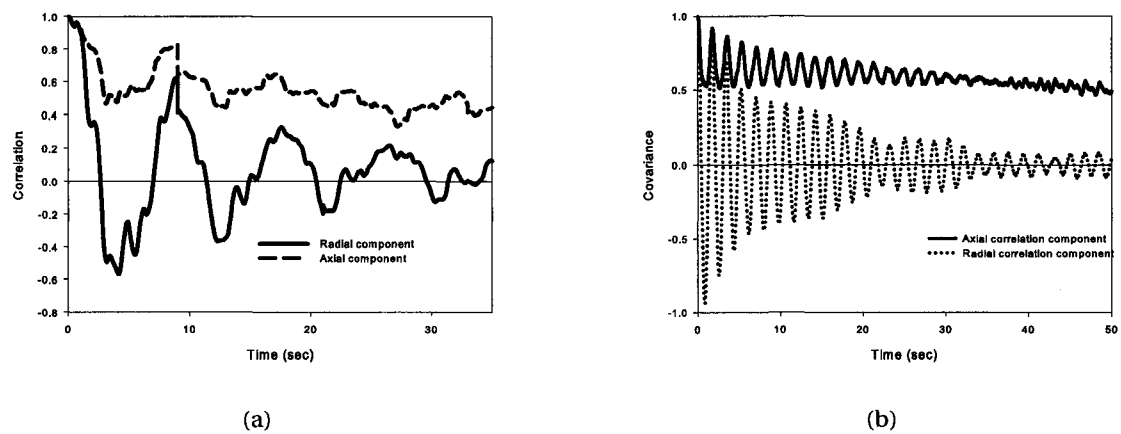


FIG. 4.3 – Composantes axiales et radiales de la corrélation dans a) le mélangeur en V et b) le mélangeur cylindrique.

choisi pour l'expérience consiste en des billes de verre de 3 mm de diamètre (mélangeur en V) et une formulation lactose-avicel ($d_{50}=780\mu\text{m}$) dans le mélangeur cylindrique.

La définition 4.1 comporte une hypothèse quant à la connaissance de la position des particules dans le système. En effet, nous devons connaître la position exacte d'un ensemble de particules dans le mélangeur pour lequel la corrélation entre la position au temps t et la position initiale est calculée. Il est possible de générer un ensemble de particules à partir de l'observation de la trajectoire d'une seule particule à l'aide de la RPT. Généralement, ceci est possible lorsque l'hypothèse ergodique est vérifiée (c.f. section 3.3). La propriété d'un système ergodique est alors utilisée, à savoir que la moyenne temporelle d'une trajectoire dans un espace compact est équivalente à la moyenne des trajectoires de toute la population de particules dans le même espace. Donc, en observant une particule se déplacer pendant une longue période de temps, ceci est équivalent à observer le déplacement de toutes les particules, en moyenne.

À partir de cette propriété, il est donc possible de générer un ensemble de particules virtuelles à partir de l'observation d'une seule particule au fil du temps. Deux procédures sont généralement employées, telles que présentées à la figure 4.4. Dans le cas de la figure 4.4a, un volume de contrôle V est considéré. Chaque fois que la particule passe par le volume de contrôle, ce point d'entrée est considéré comme le point de départ d'une nouvelle trajectoire de particule. Cette méthode a le principal désavantage de générer des trajectoires de longueurs différentes, du fait que la particule peut croiser plusieurs fois le volume en question durant un court intervalle de temps et ne plus y entrer avant une longue période. Afin de palier à cette limite, une autre méthode est utilisée, telle que présentée à la figure 4.4b. Cette technique génère des trajectoires indépendantes d'une longueur constante et finie. Ceci est effectué en

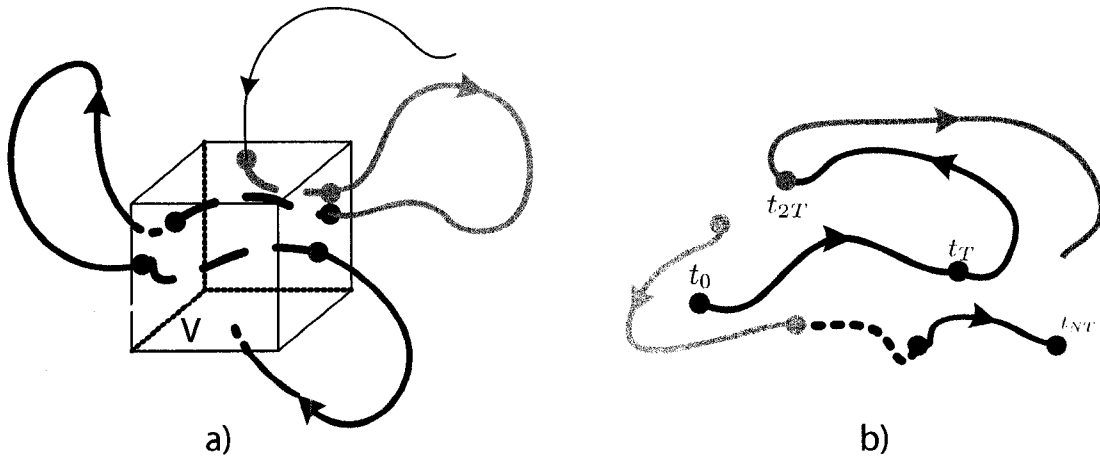


FIG. 4.4 – Deux méthodes pour la construction de particules virtuelles à partir d’une seule trajectoire de particule. a) La méthode du volume de contrôle, b) Méthode des trajectoires à longueur constante.

divisant la série temporelle en N différentes trajectoires d’une longueur fixe T . Il en résulte alors un ensemble de N trajectoires indépendantes de longueur T représentant, de manière virtuelle, l’écoulement de N particules. L’indépendance des trajectoires dans le dernier cas est mis en évidence par le calcul de la mesure de mélange. En effet, si les trajectoires sont indépendantes, alors la mesure de mélange diminue puisque cette mesure est une mesure de la corrélation entre les différentes trajectoires. Une fois que cet ensemble de particules virtuelles est généré, il est alors possible de calculer la métrique de mélange développé plus haut directement tel que nous le ferons dans la section suivante.

La figure 4.2 présente l’évolution de la borne supérieure de mélange β_{ws} . À partir de ces courbes, il est possible d’observer que les mécanismes de mélange dans ces deux systèmes souffrent du faible taux de transfert de masse axial, ce qui confirme aussi les observations relevées dans la littérature (Lemieux et al., 2007; Moakher et al., 2000; Alexander et al., 2003, 2005). Cette limitation axiale est clairement mise en évi-

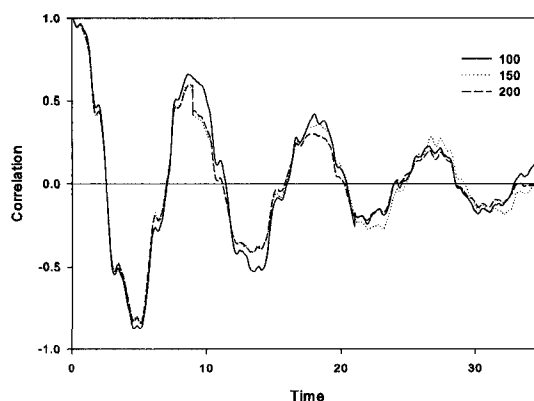


FIG. 4.5 – Effet du nombre de particules considérées pour le calcul de la courbe de mélange radial.

dence en traçant l'évolution de la composante axiale de la corrélation, tel que présenté à la figure 4.3. Le nombre de traceurs considérés dans le calcul ne semble pas affecter les résultats, tel que présenté à la figure 4.5. L'apparente périodicité de la mesure semble dûe à un artéfact géométrique. Pour éliminer cet artéfact, la mesure pourrait être observée après chaque période caractéristique (ou période) sans pour autant perdre d'information sur l'évolution du mélange, puisque c'est le mélange par unité de temps caractéristique qui nous intéresse.

4.5.2 Mélange de particules bidisperses avec la DEM

Un deuxième cas est étudié afin de mettre en évidence la capacité de la définition et la mesure de mélange au sens large β_{ss} . Pour ce faire, un mélange de particules de deux tailles (1.5 et 3.0 mm de diamètre) est étudié. Les particules sont soumises à une rotation dans un cylindre d'un diamètre de 15 cm et d'une longueur de 15 cm (sans condition frontière périodique). La vitesse angulaire est de 10RPM. Ce système de mélange à ratio de taille 1 :2 est connu pour mener à la formation de patrons de sé-

grégation stables à la fois dans la direction radiale (Rapaport, 2007; Meier et al., 2007) et axiale (Hill et al., 1999; Ottino et Khakhar, 2000). Les mesures β_{ws} et β_{ss} sont appliquées systématiquement sur le système en prenant soin de ne conserver que 2 variables indépendantes (qui sont respectivement r et z , soit les directions radiales et axiales) puisque ce système possède moins de 3 dimensions actives tel que discuté dans la section précédente. La figure 4.6 présente l'évolution de ces deux mesures en fonction du temps.

Le phénomène de ségrégation est clairement visible sur la courbe β_{ss} puisqu'il s'agit de la seule mesure qui permet de considérer cette propriété. Cette courbe mène à une asymptote puisque la différence de taille crée une ségrégation et promeut une organisation particulière tel que révélé à la figure 4.7. Les figures 4.7(a)-(b) présentent les patrons axial et radial de mélange avec une fonction couleur indépendante de la taille, ce qui permet de visualiser le mélange au sens faible (i.e. sans égard à des propriétés). Les figure 4.7(c)-(d) quant à elles présentent les profils de mélange avec une fonction couleur qui dépend de la taille. On peut relever la présence de la ségrégation par taille et qui est mise en évidence par la valeur de l'asymptote sur la courbe β_{ss} .

4.5.3 Mélange de fluides dans un Kenics

Parmi les définitions établies, le mélange au sens faible peut aussi s'appliquer au cas de fluides tel que le mélange dans un mélangeur statique Kenics, tel que présenté par Avalosse et Crochet (1997) et Heniche et al. (2005b). Le champ de vitesse est calculé en utilisant une méthode d'éléments finis. À partir du champ de vitesse obtenu, des particules libres sont advectées le long des lignes de courant, en négligeant l'effet des particules sur le champ de la partie fluide, en utilisant une méthode de calcul de trajectoires élément par élément, tel que présenté par Heniche et Tanguy (2006). Les

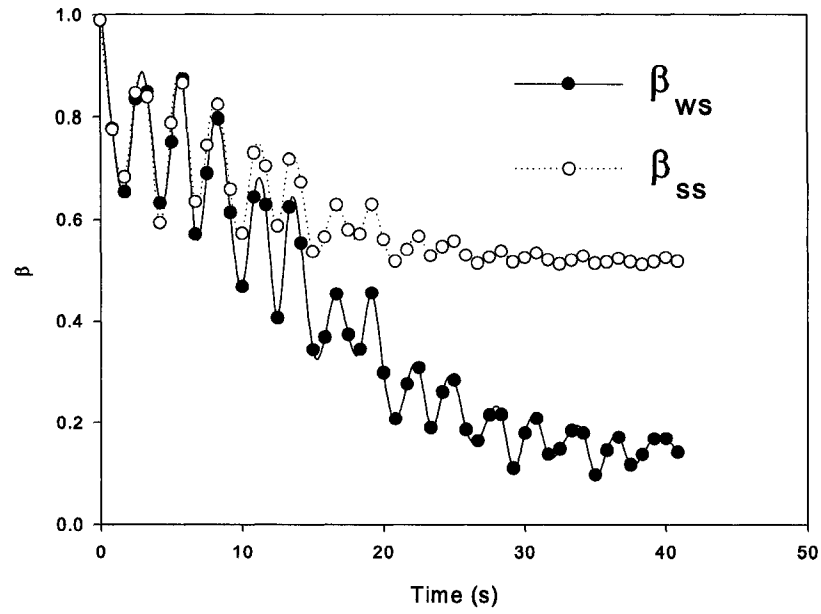


FIG. 4.6 – Évolution du mélange au sens restreint β_{ws} et au sens large β_{ss} .

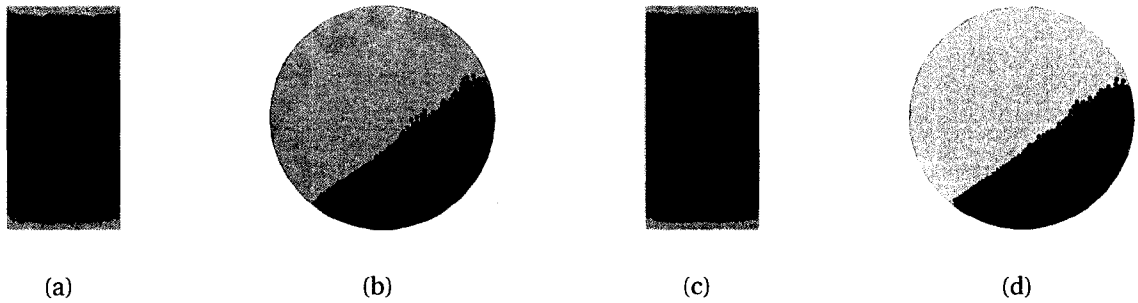


FIG. 4.7 – (a)-(b) : Profils axial et radial de la fonction couleur indépendante de la taille qui permet de représenter le mélange au sens faible. (c)-(d) Fonction couleur identifiant la taille des particules qui révèle une claire corrélation entre la répartition des particules et leur taille.

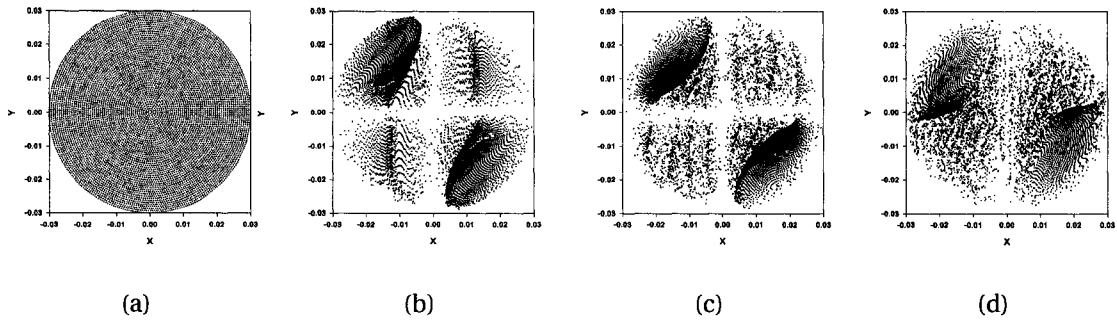
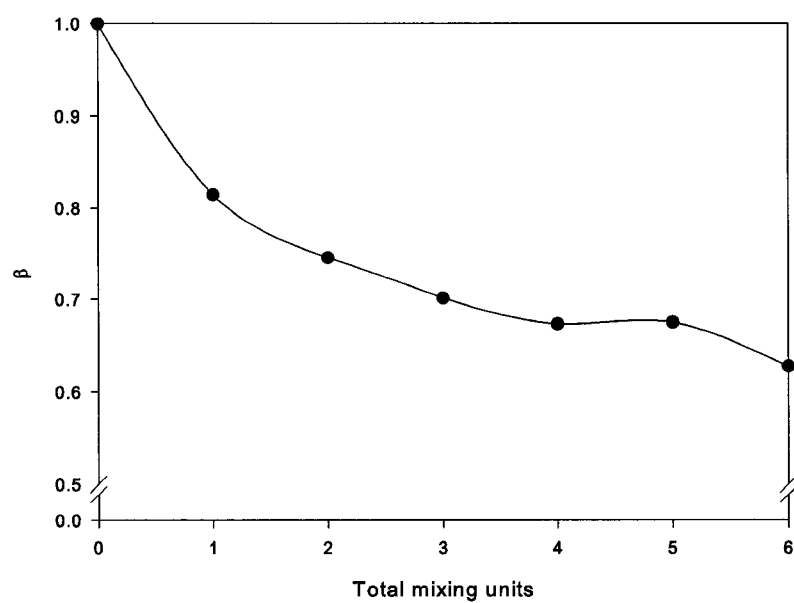


FIG. 4.8 – Sections de Poincaré dans le mélangeur Kenics. (a) Distribution initiale, (b) $N=2$, (c) $N=4$, (d) $N=6$. (*Données gracieusement rendues disponibles par Dr. M. Heniche et Pr. P. A. Tanguy*)

sections de Poincaré à la sortie de certaines unités de mélange sont présentées à la figure 4.8(a)-(d). La mesure β_{ws} est calculée en utilisant chacune des 6749 trajectoires qui croisent le plan de Poincaré. L'évolution de β_{ws} est ensuite présentée à la figure 4.9. On peut remarquer que la valeur de β_{ws} décroît géométriquement. Le calcul du vecteur α à la sortie de chacune des unités du mélangeur révèle en fait que la corrélation change de direction après chacune des unités, alternant ainsi de haut en bas et de droite à gauche.

4.6 Conclusion du chapitre

Ce chapitre a permis de développer une métrique invariante pour le suivi du mélange dans un système basé sur une définition formelle. Le mélange au sens faible souligne l'évolution de la corrélation entre un observable lié au champ de la position initiale des particules et leur position au temps t . Le mélange au sens restreint ne peut pas capturer les mécanismes de ségrégation puisqu'il ne tient pas compte des propriétés des particules. Pour cette raison, une définition plus stricte, le mélange au



(a)

FIG. 4.9 – Évolution du mélange au sens restreint β_{ws} en fonction du nombre d'éléments traversés dans le mélangeur Kenics.

sens large, permet d'incorporer une composante liée à ces aspects. Par construction, les mesures sont invariantes par rapport au système de coordonnées et à plusieurs opérations de rotation, symétrie, homothétie et translation. Il s'ensuit que la direction de corrélation maximale se trouve à être la direction selon laquelle le mélange est le plus pauvre.

Pour illustrer le potentiel de ces mesures, trois cas différents ont été investigués avec des spécificités particulières, deux exemples basés sur des données numériques, un autre sur des données expérimentales. Cette approche a démontré son attrait par le fait qu'elle contribue à fournir une borne supérieure de n'importe quelle autre courbe de mélange.

Chapitre 5

Extension de la RPT aux poudres fines

5.1 Contexte

[†] Pour clore cette première partie de la thèse, nous nous interrogeons sur une nouvelle voie pour l'étude du mélange dans les systèmes granulaires. Les méthodes classiques de suivi de particules radioactives permettent, tel qu'il a été révélé dans les chapitres précédents, d'obtenir d'innombrables informations au sujet de l'écoulement des particules dans plusieurs types de géométries et conformations. Ces techniques, nous l'avons vu, sont basées sur le suivi d'une seule particule radioactive qui, en théorie, possède les mêmes caractéristiques que les autres particules qui composent le système étudié. Ces approches ont l'avantage d'être non intrusives et précises. Ces techniques ont également fait l'objet de plusieurs améliorations depuis les dernières années, menant à des technologies fiables qui permettent d'étudier des écoulements

[†]Ce chapitre fait partie d'un article en préparation pour soumission dans J. Doucet, O. Dubé, J. Bouffard, F. Bertrand and J. Chaouki, *A new bulk radioactive particle tracking method*, AIChE Journal, En préparation.

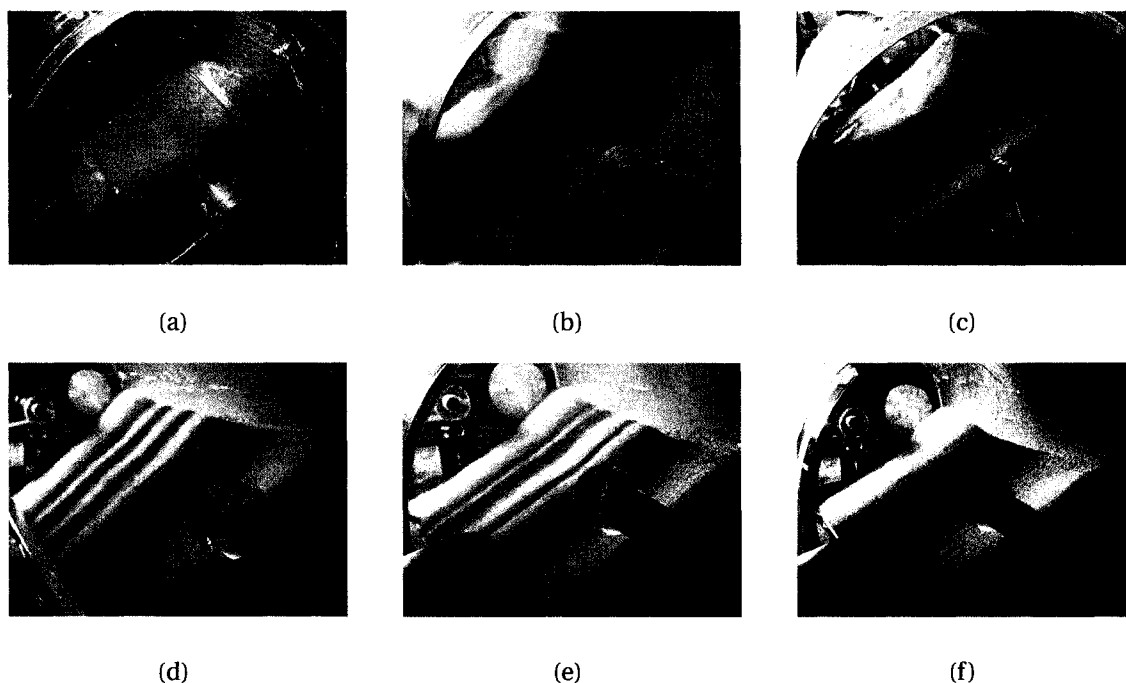


FIG. 5.1 – Les matériaux de tailles différentes se séparent sous l'action de la rotation dans un mélangeur cylindrique. La ségrégation axiale apparaît dès les premières rotations, mais les patron définitifs (tels que ceux présentés ici) apparaissent après environ 100 rotations. Les particules jaunes, blanches et bleues ont des diamètres respectifs de 200, 500 et 700 microns environ.

complexes (Roy et al., 2002; Degaleesan et al., 2002; Doucet et al., 2005).

Toutefois, malgré ces avancées techniques, ces méthodes demeurent difficiles à utiliser pour comparer de façon quantitative l'écoulement dans des systèmes granulaires denses. Ceci provient essentiellement du fait que ces systèmes sont très sensibles à la ségrégation par différence de taille (S-) et de densité (D-), tel que relevé par Hill et al. (1999) et Khakhar et al. (1999), et expérimentalement dans notre laboratoire (figure 5.1). Il y a donc apparition de patrons de ségrégation axial et radial de sorte que les particules plus petites suivent des trajectoires différentes de celles des grosses particules, et similairement pour les particules ayant une densité plus élevée. Il en ré-

sulte alors des zones de matériel (ou bandes) dans lesquelles certaines classes de particules sont confinées. Il s'agit alors des caractéristiques d'un système non-ergodique, signifiant qu'il existe des sous-ensembles fermés qui ne communiquent pas entre eux (non-transitifs). Cet effet est clairement mis en évidence à la figure 5.2. Dans cette figure, le champ de vitesse semble conforme aux résultats attendus, mais le diagramme d'occurrence nous révèle que le traceur ne se déplace pas de manière égale dans tous les endroits du système, ce qui remet en question la notion d'ergodicité. Ce phénomène a aussi été révélé par Ingram et al. (2005).

L'idée à la base de ce chapitre vise à utiliser un ensemble de particules ayant la même distribution granulométrique et les mêmes propriétés que les autres particules dans le système. Ainsi, plutôt que d'utiliser une seule particule comme dans le cas de la RPT et la PEPT, l'approche proposée vise à mettre plusieurs particules radioactives dans le système et de suivre la dispersion de ces particules dans l'espace en fonction du temps. Cette approche propose de reconstituer, non pas un ensemble de trajectoires (comme ce qui est le cas des techniques velocimétriques), mais plutôt un champ scalaire de concentration.

5.2 Méthodologie proposée

Cette hypothèse d'ergodicité, tel que discuté précédemment, est fondamentale à la RPT et à la PEPT puisque la trajectoire d'une seule particule au cours d'une période suffisamment longue est utilisée pour générer le champ global anticipé par la population totale de particules. En raison de la perte d'ergodicité dans le système lié à la présence de ségrégation, nous croyons que cette hypothèse nécessite d'être étudiée notamment pour les raisons suivantes :

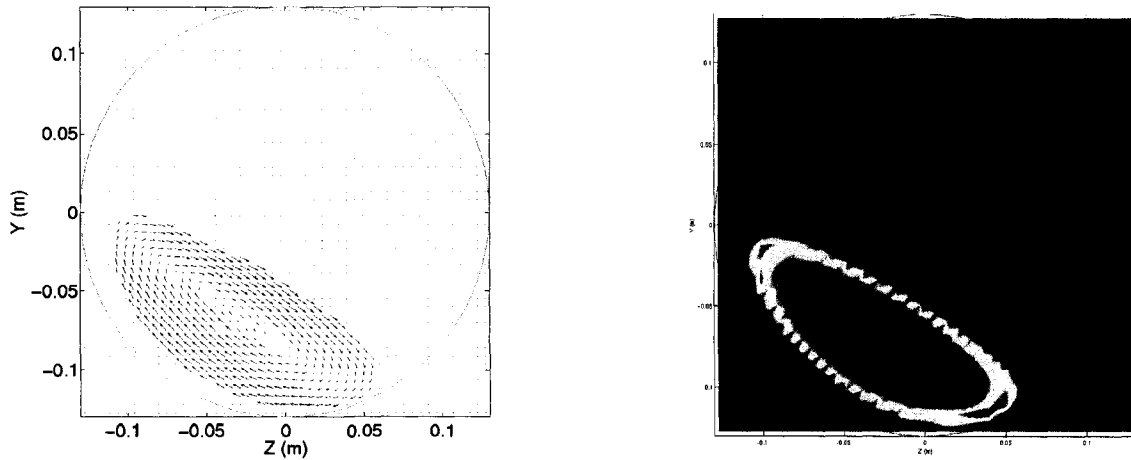


FIG. 5.2 – Mesures RPT d'un cylindre en rotation à 20 RPM. (a) Champ de vitesse. (b) Champ d'occurrence.

1. Le traceur doit être dopé avec un isotope spécifique (généralement le scandium ou l'or) qui, en conséquence, change ses propriétés physiques (e.g. densité, rugosité, propriétés de surface). De plus, le traceur doit être activé dans un réacteur nucléaire et, pour éviter toute désintégration, il doit être enrobé d'une couche de polymère thermodurcissable. Il devient alors difficile de contrôler à la fois la densité, la taille, la sphéricité et la friction à la surface du traceur et le rendre exactement similaire aux autres particules inertes.
2. Afin de pouvoir localiser correctement le traceur dans le système, une activité minimale de $200 \mu\text{Ci}$ est nécessaire. Puisque cette activité est proportionnelle à la masse de la particule, le temps d'activation augmente avec l'inverse du cube du diamètre de la particule étudiée, de sorte qu'en pratique, une limite inférieure de taille de particule de $200 \mu\text{m}$ de diamètre est difficile à franchir.

Ce chapitre présente une nouvelle technique de suivi de particules radioactives (BRPT) qui permet d'obtenir d'importantes informations au sujet de la dynamique

de mélange de particules sans les limitations de la méthode classique. Elle s'applique aisément aux particules d'un diamètre inférieur à $100\ \mu\text{m}$ et la méthode employée pour la fabrication des traceurs les rend exactement identiques aux particules inertes. Contrairement à la technique classique où une seule particule est suivie, un ensemble de particules avec sa distribution caractéristique de propriétés (taille, densité, sphéricité, etc...) est suivi, ce qui permet d'obtenir une information davantage représentative de la réalité des poudres étudiées qui, dans les faits, suivent une distribution de propriétés plutôt que d'avoir des propriétés uniques.

5.3 La méthode BRPT (Bulk Radioactive Particle Tracking)

L'idée derrière la BRPT est de suivre l'évolution d'un ensemble de particules, originellement injectées à la manière d'un Dirac, en fonction du temps. Sous l'influence de l'écoulement, les particules localisées seront ainsi soumises à la convection et à la diffusion inhérente au système étudié. L'idée est similaire à l'utilisation d'un traceur coloré dans les systèmes liquides transparents et comporte les mêmes limitations :

1. L'écoulement doit être topologiquement transitif dans le domaine étudié.
2. La position initiale de l'injection de particules a une influence directe sur les dynamiques de mélange. On comprend clairement qu'un ensemble de particules disposées dans une zone à fort cisaillement sera plus rapidement dispersé dans le système que si les particules sont injectées dans une zone plutôt inerte.
3. La méthode ne donne qu'une mesure globale du mélange et des temps de séjour sans fournir l'information liée aux champs de vitesses et de fluctuations de vitesses.

L'originalité de la méthode consiste à utiliser un rayonnement gamma, rayonnement différent du rayonnement optique, ce dernier étant inutilisable dans le cas de systèmes opaques, afin d'obtenir de façon précise l'évolution du mélange et de l'homogénéité dans un système granulaire. De plus, grâce à un protocole simple qui sera présenté dans la section 5.4.1, elle permet de radiomarquer n'importe quelle formulation de poudres et n'altère aucunement les propriétés de la poudre radiomarkée. Il s'agit donc d'une méthode non-intrusive avec un marqueur qui possède exactement les mêmes propriétés que le système étudié.

5.3.1 Dispersion radiale

Deux mécanismes sont présents dans le système étudié (i.e. un mélangeur cylindrique), tel que discuté par Khakhar et al. (1999) et Sherritt et al. (2003). Le mélange radial est principalement lié à l'advection causée par la rotation du système. Le mélange axial, en revanche, est principalement lié à la vibration des particules, créant ainsi de la diffusion. À l'aide de la BRPT, le signal enregistré montre un signal périodique clair immédiatement après l'introduction du traceur radiomarké. Ainsi, sous l'effet de la rotation, les particules vont se disperser et ainsi les pics d'intensité vont se dissiper au fur et à mesure pour atteindre, à l'état de mélange radial, une valeur plateau.

Pour analyser ces courbes, on recourt à la théorie des distributions de temps de séjour (RTD), largement employée. Ainsi pour un pic quelconque n issu d'un signal $Q(t)$, nous introduisons

$$E(t) = \frac{Q(t)}{\int_{t_n}^{t_{n+1}} Q(t) dt}. \quad (5.1)$$

Définissons maintenant les quantités

$$\tau_n = \int_{t_n}^{t_{n+1}} t E(t) dt, \quad (5.2)$$

$$\sigma_n^2 = \int_{t_n}^{t_{n+1}} (t - \tau_n)^2 E(t) dt, \quad (5.3)$$

où t_n est le temps correspondant à la n -ième valeur minimale du signal et, de manière similaire, t_{n+1} est le temps correspondant à la $(n + 1)$ -ième valeur minimale du signal. Posons $\Delta\sigma^2(n)$ donné par :

$$\Delta\sigma_n^2 = \sigma_n^2 - \sigma_{n-1}^2, \quad (5.4)$$

qui correspond à la dispersion radiale effectuée entre t_n et t_{n+1} .

5.3.2 Dispersion axiale

De manière similaire, il est possible de capturer la dispersion axiale à l'aide du signal. L'intérêt ici provient du fait que le mécanisme de mélange radial est largement plus rapide que le mécanisme de dispersion axiale, ce qui permet de poser l'hypothèse que chaque tranche radiale le long du mélangeur est parfaitement mélangée. Considérons l'équation de convection et diffusion pour la conservation de la matière :

$$\frac{dC}{dt} = v_z \frac{\partial C}{\partial z} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}, \quad (5.5)$$

où $C = C(z, t)$ est la concentration qui dépend de la position axiale z . D_z est le coefficient de diffusion le long de cette direction. Dans un mélangeur cylindrique horizontal, la vitesse axiale est nulle, de sorte que $v_z = 0$ et le nombre de Peclet axial est voisin de 0. En pratique, ce Peclet est non-nul en raison des effets de parois. En vertu de cette simplification, il est alors possible de simplifier l'équation de conservation pour obtenir

$$\frac{dC}{dt} = D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}, \quad (5.6)$$

Afin de relier le signal mesuré par les détecteurs à un transfert de matière, il est nécessaire de déterminer la relation entre le niveau de radiation mesuré et la concentration de traceur présent dans une section spécifique. La demi-vie de l'isotope pouvant être parfois de l'ordre du temps de l'expérience, il est nécessaire de retirer cette contribution du signal en utilisant un témoin contenant le même isotope. On peut poser alors que la radiation est donnée par le produit de deux fonctions

$$\Phi^m(z, t) = A(z, t) \exp(-\tau t), \quad (5.7)$$

$$\Phi^0(t) = A_0 \exp(-\tau t), \quad (5.8)$$

où τ est le taux de décroissance de la source, $\Phi^0(t)$, $\Phi^m(z, t)$ sont les comptes enregistrés à partir du témoin et à partir d'une section transversale centrée en z au temps t , respectivement. Introduisons le rapport de radiation

$$\psi(z, t) = \frac{\Phi^m(z, t)}{\Phi^0(t)} = \frac{A(z, t)}{A_0}. \quad (5.9)$$

Ce rapport permet donc d'enlever la contribution liée à la désactivation de la source au signal. Il faut maintenant trouver une relation entre le signal mesuré par les détecteurs et la concentration réelle des traceurs radioactifs dans chacune des bandes axiales. Pour ce faire, on pose que la concentration de traceurs dans une section est proportionnelle à la radiation totale $R(z, t)$ émanant de cette bande. Ainsi, on aura

$$R(z, t) = kC(z, t), \quad (5.10)$$

pour $k > 0$. Pour déterminer le terme $R(z, t)$ qui est la radiation totale émanant d'une bande centrée en z , il faut résoudre un problème similaire au problème présenté au chapitre 2. La différence dans ce cas est que nous cherchons la radiation totale d'une série de bandes en fonction des mesures enregistrées par tous les détecteurs. Pour ce

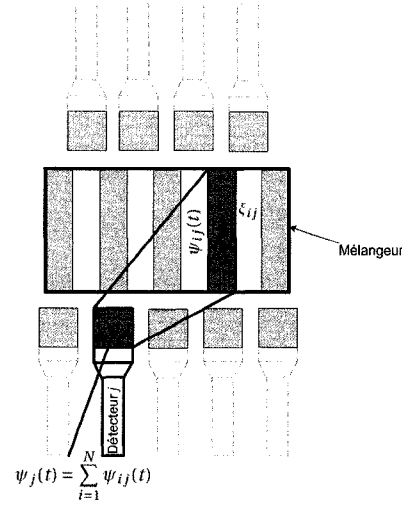


FIG. 5.3 – Schéma représentant le calcul de la radiation mesurée par chacun des détecteurs. Dans un premier temps, l'efficacité ξ_{ij} entre une bande i et un détecteur j est calculée. La radiation totale (ou le rapport de radiation) mesurée par le détecteur j est alors la somme de toutes les contributions provenant de chacune des bandes i .

faire, on applique alors les équations de base en se rappelant que la radiation enregistrée par un détecteur à scintillation i est donnée par

$$\Phi_i(z, t) = \frac{T\nu R(z, t)\phi\xi_i(z, t)}{1 + \tau\nu R\phi_i\xi(z, t)} \quad (5.11)$$

$$= \frac{T\nu k_i C(z, t)\phi\xi_i(z, t)}{1 + \tau\nu k_i C(z, t)\phi\xi_i(z, t)}, \quad (5.12)$$

où T est la période d'échantillonnage, $R(z, t)$ l'activité totale de la bande localisée en z au temps t , ϕ le ratio du discriminateur, τ le temps mort du détecteur et $\xi_i(z, t)$ est l'efficacité de la bande centrée en z par le détecteur i au temps t . Puisque les réglages de chacun des détecteurs peut être différent au niveau du discriminateur, une valeur de k_i est spécifique à chacun de ces détecteurs et doit être déterminée en procédant à une calibration. Considérons maintenant N détecteurs disposés autour du système étudié (voir figure 5.3). Il est possible ensuite de discrétiser le volume V de ce système

en N sections transversales S_i pour $i = 1, \dots, N$, pour lesquelles l'activité totale $R_i(z, t)$ est inconnue. Dénotons par ξ_{ij} l'efficacité liée à la région S_i par rapport au détecteur j . Cette efficacité est calculée en utilisant le programme développé au chapitre 2. Dans un premier temps, la section i est décomposée en M points sur lesquels une simulation Monte-Carlo est effectuée. L'efficacité de la bande est alors la moyenne de l'efficacité calculée sur les M points inclus dans cette bande.

Par la suite, nous écrivons que $\psi_{ij}(t)$ est la contribution relative de la bande i à la mesure enregistrée par le détecteur j au temps t . S'en suit donc que la mesure totale enregistrée par le détecteur j est la somme des contributions de toutes les bandes, soit

$$\psi_j(t) = \sum_{i=1}^N \psi_{ij}(t). \quad (5.13)$$

Par expansion et en utilisant le rapport de radiation, on trouve que

$$\psi_j(t) = A \sum_{i=1}^N \frac{T \nu k_j C(i) \phi \xi_{ij}(t)}{1 + \tau \nu k_j C(i) \phi \xi_{ij}(t)}, \quad (5.14)$$

avec $A > 0$ et $C(i)$, la concentration de traceurs dans la bande i . Il se trouve alors que les valeurs de $C(i)$ sont obtenues en résolvant ce problème pour tout j .

5.3.3 Analyse de la concentration par échantillonnage radioactif

Tel que présenté à la section précédente, nous pouvons retrouver la radiation aisément en supposant que la concentration en actif radiomarqué est proportionnelle au rapport de radiation $R(z, t)$. Afin de déterminer cette constante de proportionnalité $k > 0$, une série d'échantillons standard est produite avec différentes concentrations de traceurs radiomarqués. Ces échantillons utilisent des particules de même activité que le témoin dont l'activité est suivie en permanence par un détecteur dédié (voir figure 5.7). Une courbe d'étalonnage est ensuite créée (figure 5.4) pour une activité no-

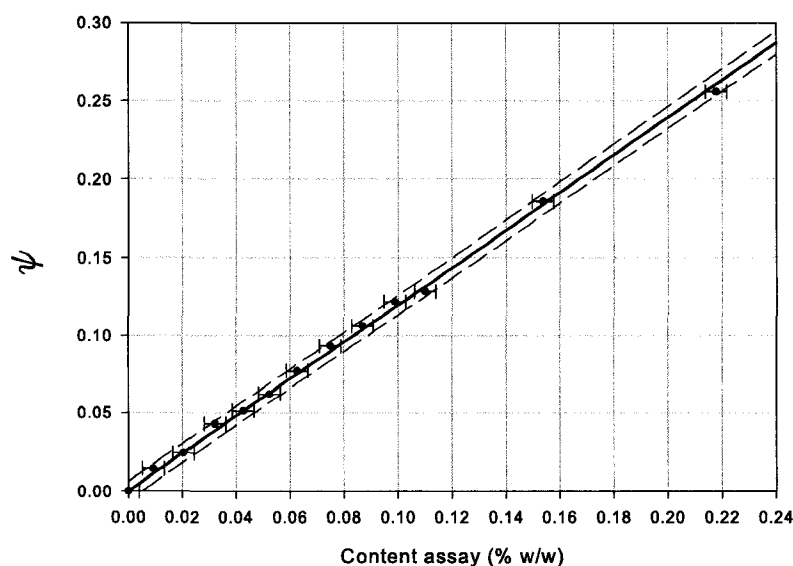


FIG. 5.4 – Évolution de ψ en fonction de la concentration massique de traceurs radio-marqués dans un échantillon standard.

minale spécifique. Cette courbe présente le rapport de la radiation lue dans l'échantillon (100 g) sur la radiation du contrôle (masse totale de l'échantillon contrôle fixe de 2 g) afin de normaliser les résultats.

5.4 Matériel et méthode

5.4.1 Fabrication du traceur

Des particules de 200 microns sont fabriquées à l'aide d'un procédé de rotogravure. Des particules de 750 microns sont fabriquées avec un procédé d'extrusion-sphéronisation. La formulation dans les deux cas est constituée de 40% massique de lactose, 40% massique d'avicel PH101 et 20% massique de NaCl. Le sel de table est utilisé afin d'introduire des ions Na qui formeront l'isotope Na-24 après activation dans

le réacteur Slowpoke. Les distributions de tailles de ces deux classes de particules sont présentées à la figure 5.5. Les clichés SEM montrent clairement la présence de NaCl à la surface (figure 5.6). La distribution granulométrique est également très peu affectée par le processus d'irradiation en raison des procédés de fabrication qui rendent les particules très denses.

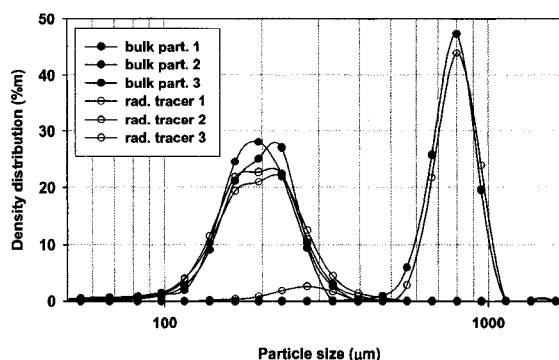


FIG. 5.5 – Distribution de tailles de particules pour les particules de 200 et 750 microns avant (bulk part.) et après (rad. tracer) irradiation.

5.4.2 Activation du traceur

Les particules sont introduites dans un réacteur Slowpoke pour une durée de 7 minutes. Chaque échantillon introduit a une masse de 2.0 ou 4.0 grammes. Le premier échantillon est utilisé comme témoin et le second contient la poudre qui sera insérée dans le système de mélange étudié. L'activité totale initiale de chacun des échantillons est d'environ 2.25 MBeq/g. La période d'activation est fixée afin de minimiser le temps de séjour des traceurs dans le réacteur et ainsi minimiser leur détérioration au contact des radiations et de la chaleur.

Lors de l'activation, deux isotopes (demi-vie) sont majoritairement formés, soit le sodium 24 (15h) et le chlore 38 (37 min). Les échantillons ont été utilisés trois heures

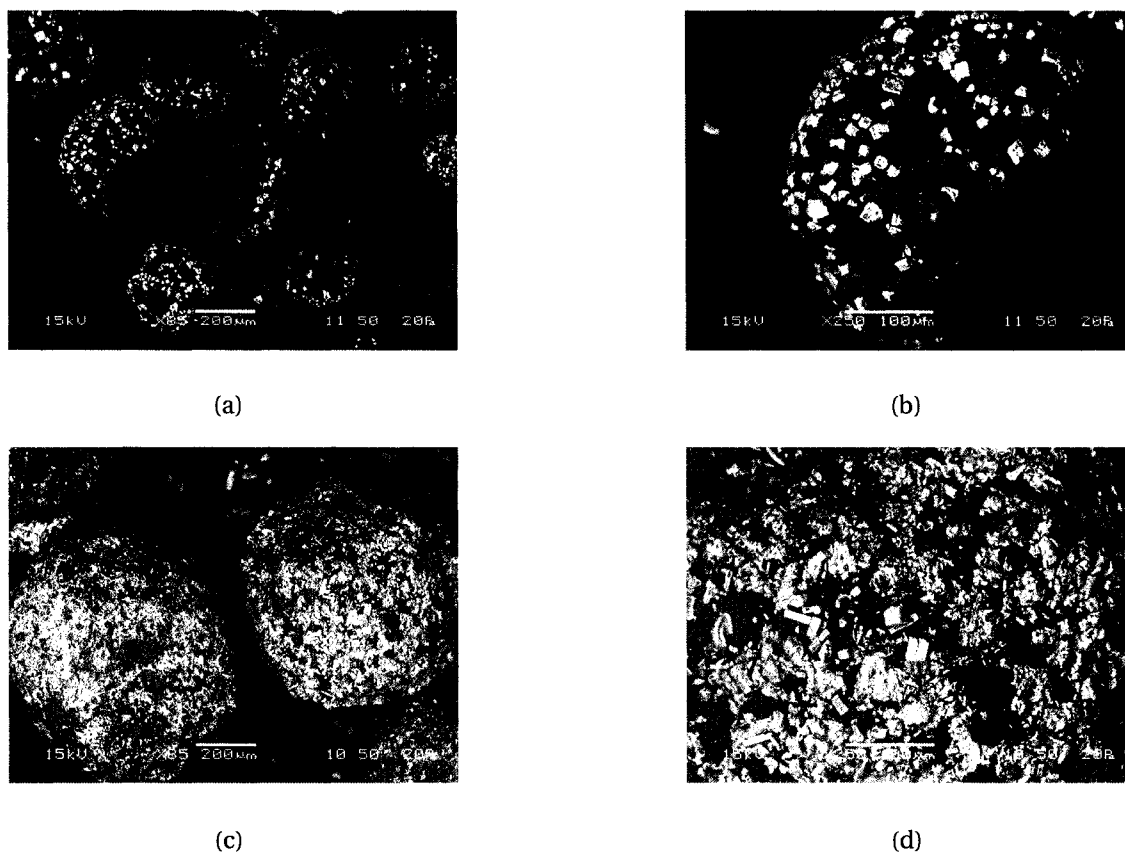


FIG. 5.6 – Images SEM des particules de (a)-(b) 200 microns et (c)-(d) 750 microns. On y aperçoit les cristaux de NaCl à la surfaces des particules.

après l'activation afin de permettre au chlore 38 de se désintégrer complètement. Des traces d'autres isotopes sont présentes, mais négligeables. Le sodium 24 émet deux rayons gamma d'intensités distinctes, soit 1369 keV et 2754 keV.

5.4.3 Système d'acquisition

Le système d'acquisition de données utilisé pour la BRPT consiste en 7 cartes à comptage rapide (A-B Compact Logics 4 channels) opérées par un automate Allen-Bradley Compact Logics (L35E). L'acquisition est effectuée en temps réel par RSVIEW32. L'acquisition est ininterrompue durant toute l'expérience, ce qui est possible en rai-

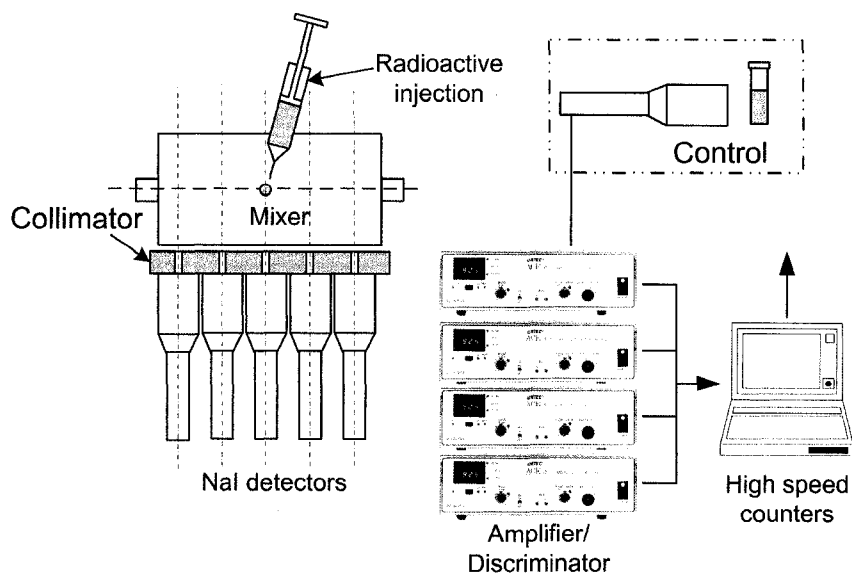


FIG. 5.7 – Montage typique pour la BRPT.

son du nouveau montage construit durant cette thèse. Un total de 5 détecteurs à cristal d'iodure de sodium (NaI-Tl) de 2.5 pouces de diamètre est utilisé et connecté à une base photomultiplicatrice (Ortec model 276). Un amplificateur/discriminateur (Ortec ACE Mate model 925) permet la discrimination des rayons gamma enregistrés.

Tel que présenté sur la figure 5.7, un détecteur de scintillation enregistre l'évolution de la radiation dans un échantillon témoin. Afin de permettre la validation des mesures, différents échantillons seront extraits manuellement afin de déterminer leur concentration en isotopes radioactifs à l'aide d'une méthode d'extraction similaire à celle de Lemieux et al. (2007).

5.5 Résultats et discussion

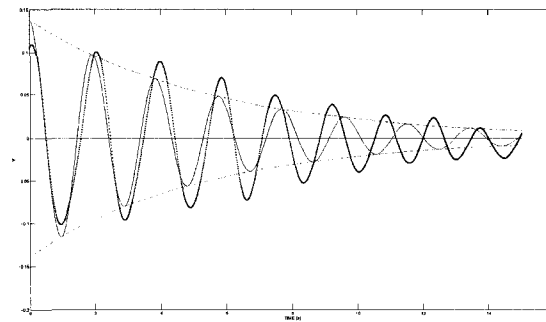
5.5.1 Mélange radial

Pour appliquer la méthode, nous étudions deux systèmes composés de particules de 200 et 750 microns, respectivement, dans un mélangeur cylindrique (I.D. 30cm, longueur 30cm). La vitesse de rotation est de 15 RPM. Dans chacun des cas, 4.00 grammes de traceurs radioactifs sont introduits dans le centre du cylindre. Tel que discuté précédemment, ces traceurs ont les mêmes propriétés que les particules inertes. La figure 5.8 présente l'évolution du signal immédiatement après l'injection. Il est aussi possible de calculer la dispersion en utilisant l'Eq. 5.4 à partir des deux courbes présentées. Les résultats sont présentés au tableau 5.1. On peut alors observer que la dispersion dans le cas des particules de 750 microns est plus faible que la dispersion dans le cas des particules de 200 microns.

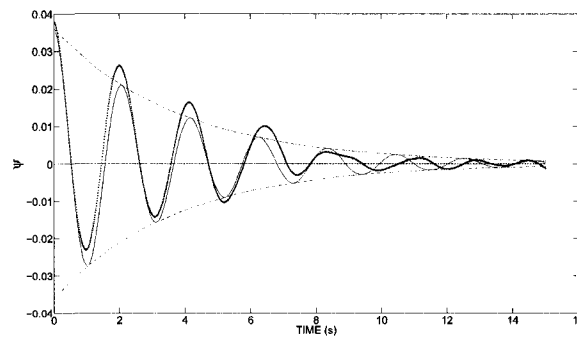
TAB. 5.1 – Coefficients de dispersion calculés pour les particules de 200 et 750 microns à 15 RPM.

	Paramètre	1	2	3	4	5	6
200 μm	τ_n (s)	0.920	1.05	1.08	1.07	1.14	1.23
	$\sigma_n (\times 10^3)$	498	548	585	594	637	706
	$\Delta\sigma_n (\times 10^3)$	-	228	204	103	230	304
750 μm	τ_n (s)	1.01	1.03	1.06	0.86	0.89	0.85
	$\sigma_n (\times 10^3)$	416	432	473	401	438	434
	$\Delta\sigma_n (\times 10^3)$	-	116	192	-	176	-

En calculant le coefficient de décroissance de la courbe ainsi que la période du signal, il est possible d'obtenir un modèle de décroissance basé sur la fonction suivante



(a)



(b)

FIG. 5.8 – Évolution du signal dans un mélangeur cylindrique à 15RPM dans la direction radiale pour (a) les particules de 750 microns, (b) les particules de 200 microns.

$$f(t) = k_1 e^{-\lambda t} \cos\left(\frac{2\pi}{T} t\right). \quad (5.15)$$

Les résultats obtenus pour les deux systèmes étudiés sont présentés au tableau 5.2. Les résultats démontrent clairement que le système se mélange davantage dans le cas impliquant les particules de 200 microns en observant le produit adimensionnel $T\lambda$ qui représente le taux de décroissance par période caractéristique. On remarque également que les valeurs de τ_n calculées au tableau 5.1 correspondent à la moitié de la période calculée au tableau 5.2, ce qui est attendu par la définition de τ_n .

TAB. 5.2 – Paramètres de décroissance du modèle de mélange.

Système	λ (s ⁻¹)	T (s)	k_1	$T\lambda$
200 μm	0.264	2.09	0.036	0.55
750 μm	0.185	1.92	0.137	0.35

5.5.2 Mélange axial et profils de concentration

Dans le cas axial, le signal est observé sur une longue période puisqu'il est connu que ce mécanisme est largement dominé par la diffusion qui s'opère sur une échelle de temps plus grande. Tel que présenté à la section 5.3.2, la mesure est effectuée durant toute l'opération de mélange. D'abord une courbe standard est construite afin de relier la concentration en traceurs radioactifs et ψ . Cette courbe est construite en utilisant 100.00 g de matériel auquel nous ajoutons une quantité spécifique de particules radioactives. Cette courbe de calibration a été présentée à la figure 5.4. Cette courbe est ensuite utilisée afin de déterminer la concentration en traceurs radioactifs dans chacun des échantillons prélevés dans les sections transversales du mélangeur.

La méthode souffrent présentement de problèmes liés à l'algorithme d'optimisation (steepest descent) permettant de trouver les valeurs de $C(i)$ en fonction des mesures de radioactivité en utilisant l'Eq. 5.14. Il est donc impératif de poursuivre les travaux sur la résolution du problème en utilisant un algorithme d'optimisation plus performant qui permet de continuer la recherche d'optimum global au problème. En particulier, le fait que le gradient soit faible le long de certaines direction rend la convergence difficile pour l'algorithme présentement utilisé.

5.5.3 Mesures par échantillonnage radioactif

Les résultats de concentration utilisant une méthode d'échantillonnage suivi d'une analyse par radiation sont présentés au tableau 5.3. On y remarque la même tendance que dans le cas de l'analyse du mélange radial soit que les plus grosses particules se mélangent moins bien que les particules plus petites. En effet, la valeur de RSD mesurée dans le cas des petites particules est de 1.16% alors qu'il est de 7.02% dans le cas des grosses particules. Ces mesures ont été effectuées après 24 heures de mélange dans le tambour rotatif à 15 rpm. La figure 5.9 présente les mesures obtenues pour les différents répliquats.

5.6 Conclusion du chapitre

Ce chapitre a développé une méthode originale pour l'étude du mélange dans les systèmes granulaires denses. Cette technique n'est pas exclusive aux systèmes granulaires et s'applique à tout type d'écoulements monophasiques et polyphasiques. Nous avons développé la théorie requise pour pouvoir extraire les informations sur le mélange radial et axial. Nous avons montré qu'à partir du modèle de radiation, il

TAB. 5.3 – Concentration (% massique) dans différentes bandes axiales d'un cylindre rotatif à 15 rpm.

Bande	750 microns	200 microns
1	0.115	0.133
2	0.107	0.134
3	0.106	0.135
4	0.107	0.135
5	0.109	0.133
Vraie dose	0.112	0.130
RSD	7.02%	1.16%

est possible d'obtenir le profil de radiation le long du système. Certains problèmes de convergence ont été identifiés pour la résolution des profils axiaux de concentration. Néanmoins, la théorie relative au problème a été présentée de même que les paramètres (dont le coefficient de diffusion) pouvant être obtenus à l'aide de ces profils.

Un des résultats importants de cette méthode est qu'il n'existe aucune limite de taille et que les traceurs employés pour l'expérience ont exactement les mêmes propriétés que les poudres inertes. Ce résultat aura des répercussions majeures dans le domaine des poudres puisqu'il permet maintenant d'étudier une classe de particules utilisées dans l'industrie pharmaceutique, alimentaire et pétrochimique.

Finalement, une méthode de mesure de concentration utilisant des échantillons prélevés a été appliquée en utilisant les principes d'analyse par activation neutronique. La précision obtenue au niveau de la concentration en traceurs radioactifs est de loin supérieure à celle obtenue à l'aide d'autres méthodes de mesure non-intrusives telles que la spectroscopie NIR, l'effusivité, les rayons X ou la RMN. En effet,

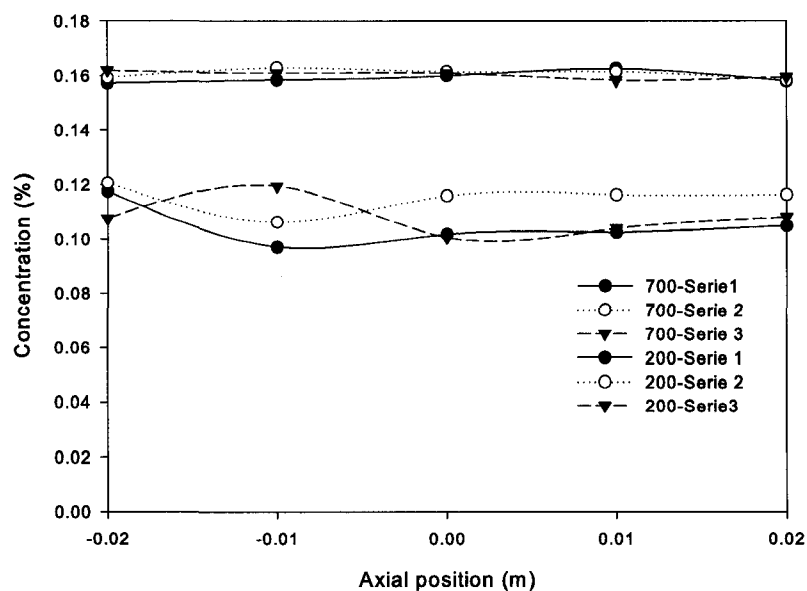


FIG. 5.9 – Profils de concentration dans un cylindre rotatif. Les mesures ont été prises en triplicata et sont présentées sur le graphique pour chacune des tailles de particules étudiées. La taille des échantillons est de 100.00 g.

nous avons présentés des résultats qui montrent que la précision atteinte est de l'ordre de 0.005% massique en valeur absolue par rapport à la concentration réelle.

Chapitre 6

Vers une vérification et validation de la méthode des éléments discrets

6.1 Contexte

[†] Alors que la partie précédente s'intéressait davantage aux aspects expérimentaux touchant la mesure du taux de mélange de matériaux granulaires, cette partie s'intéresse d'abord aux aspects de modélisation et de simulation. Afin d'amorcer cette deuxième partie de la thèse, nous proposons une discussion plus spécifique sur les aspects de convergence et d'erreurs liées aux modèles dits discrets (Discrete element methods ou DEM) qui sont des modèles de plus en plus utilisés pour la simulation d'écoulements granulaires. En fait, ces modèles étant relativement nouveaux, il existe

[†]Ce chapitre et le chapitre suivant ont inspiré la rédaction d'un article sur l'utilisation de la méthode des éléments discrets pour l'étude du mélange dans M. Lemieux, G. Léonard, J. Doucet, L.-A. Leclaire, F. Viens, F. Bertrand and J. Chaouki, *Large-scale numerical investigation of solids mixing in a V-blender using the discrete element method*, Powder Technology, Volume 181, Issue 2, 6 February 2008, Pages 205-216 (doi :10.1016/j.powtec.2006.12.009)

une littérature peu abondante s'intéressant aux aspects de vérification et de validation qui sont les sujets touchés par ce chapitre.

En effet, il est important d'effectuer une vérification du modèle implanté avant d'entreprendre une recherche visant à en caractériser les aspects plus fondamentaux. Une difficulté inhérente liée à cet exercice est qu'il est seulement possible de démontrer qu'un modèle est dysfonctionnel, et non qu'il est correct, puisqu'un nombre fini de tests ne peut pas vérifier et valider tous les aspects du modèle qui contiennent encore des erreurs (Grace et Taghipour, 2004). Trop souvent, les conclusions au sujet de la validation d'un modèle dans les cas de mélange reposent principalement sur des accords entre les courbes d'écart-type relatif (RSD) (Moakher et al., 2000; Arratia et al., 2006), sans même porter d'attention aux différentes quantités reliées à la dynamique particulaire. Tel que discuté précédemment (c.f. chapitre 4), cet indice est très grossier et ne permet de dégager qu'une mesure très globale du mouvement des particules. Dans certains cas, des auteurs s'attaquent à des problèmes présentant davantage de difficultés, principalement en ajoutant d'autres lois d'interaction entre les particules, telles que des liens cohésifs, sans s'être d'abord intéressés à vérifier la validité de leur modèle dans des cas plus simples (Alexander et al., 2006; Amarouchene et al., 2001).

On peut alors se demander ce qu'il adviendrait d'une conclusion au sujet des aspects de convergence concernant un modèle mal implanté. En effet, il devient difficile de déterminer si la divergence de la solution par rapport à la solution physique est due au modèle lui-même (erreur de modélisation), d'une erreur d'implantation ou d'erreurs liées à la méthode numérique. Ainsi, avant d'attaquer le chapitre suivant qui vise à déterminer les conditions de convergence du modèle, ce chapitre vise d'abord à appliquer la DEM à un système expérimental bénéficiant de données récentes, ce système faisant référence à l'écoulement de particules dans des silos et des trémies

avec différents angles d'écoulement. Ceci a pour principaux objectifs de :

1. Vérifier la qualité de l'implantation du modèle,
2. Vérifier les résultats obtenus avec ceux d'autres groupes de recherche dans un cas similaire,
3. Valider le modèle dans une situation particulière et ainsi augmenter la confiance dans les résultats obtenus.

Afin d'entamer cette partie de la thèse, nous allons d'abord présenter le modèle de la DEM en détail pour ensuite présenter les systèmes qui seront étudiés dans le cadre de notre programme de vérification et de validation.

6.2 Le modèle

Le modèle utilisé est basé sur la méthode originale proposée par Cundall et Strack (1979) et prend la forme de contacts normaux et tangentiels entre une paire de particules i, j :

$$\mathbf{F}_n^{ij} = k_n \delta_n^{\frac{3}{2}} \mathbf{n}_{ij} - \gamma_n \delta_n^{\frac{1}{2}} \mathbf{v}_n \quad (6.1)$$

$$\mathbf{F}_t^{ij} = -\mu \|\mathbf{F}_n^{ij}\| k_t \left(\frac{\boldsymbol{\delta}_t}{\delta_t} \right) - \gamma_t \mathbf{v}_t \quad (6.2)$$

où $\mathbf{n}_{ij} = \mathbf{r}_{ij} / \|\mathbf{r}_{ij}\|$, \mathbf{r} est le vecteur entre le centre de la particule i et le point de contact avec la particule j , \mathbf{v}_n et \mathbf{v}_t sont les composantes normales et tangentielles de la vitesse relative entre les particules i et j respectivement. Le vecteur de déformation tangentielle $\boldsymbol{\delta}_t$ entre ces mêmes particules est donné par :

$$\boldsymbol{\delta}_t = \min \left(\int_0^{t_c} \mathbf{v}_t(t') dt', \delta_{t,max} \frac{\mathbf{v}_t}{\|\mathbf{v}_t\|} \right), \quad (6.3)$$

où t_c est la durée de vie du contact et δ_n est le vecteur de déformation normale entre les particules en contact. La déformation maximale tangentielle $\delta_{t,max}$ est donnée

par :

$$\delta_{t,max} = \mu \left(\frac{2 - \nu}{2 - 2\nu} \right) \delta_n \quad (6.4)$$

Le critère de friction de Coulomb $\|\mathbf{F}_t\| \leq \mu \|\mathbf{F}_n\|$ survient naturellement lorsque $\delta_t = \delta_{t,max}$. Les constantes k_n , k_t et γ_t sont données par :

$$k_n = \frac{4}{3} \sqrt{R^*} E^*, \quad (6.5)$$

$$k_t = 1 - \left(1 - \frac{\delta_t}{\delta_{t,max}} \right)^\beta, \quad (6.6)$$

$$\gamma_t = -c_t \left(6m_i \mu \|\mathbf{F}_n\| \frac{\sqrt{1 - \delta_t / \delta_{t,max}}}{\delta_{t,max}} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (6.7)$$

où β est une constante. Dans notre cas, nous utilisons $\beta = 1$, bien que d'autres modèles utilisent $\beta = 1/2$. Le module de Young équivalent est donné par $1/E^* = (1 - \nu_1^2)/E_1 + (1 - \nu_2^2)/E_2$ et de même pour le rayon équivalent donné par $1/R^* = 1/R_1 + 1/R_2$. Dans ces expressions, m_i est la masse de la particule. Un bilan de force et de moment est ensuite appliqué sur chacune des particules et les équations suivantes sont ensuite résolues afin de trouver la position de ces particules en fonction du temps. Ainsi, pour chaque particule i :

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{x}_i}{dt^2} = \sum_{j \neq i} (\mathbf{F}_n^{ij} + \mathbf{F}_t^{ij}), \quad (6.8)$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum_{j \neq i} \mathbf{r}_{ij} \times (\mathbf{F}_n^{ij} + \mathbf{F}_t^{ij}) + \mathfrak{F}_{ij}, \quad (6.9)$$

où I_i et $\boldsymbol{\omega}_i$ sont le moment d'inertie et le vecteur de vitesse angulaire de la particule i respectivement. \mathfrak{F} est le moment lié au frottement de roulement (Zhou et al., 1999). Dans notre cas, ce terme prend la forme de $\mathfrak{F}_{ij} = -\mu_r \|\mathbf{F}_n^{ij}\| \boldsymbol{\omega}_i / \|\boldsymbol{\omega}_i\|$. Le paramètre μ_r est appelé coefficient de frottement par roulement. Ce système d'équations est résolu à l'aide de la méthode Half-Step Leapfrog Verlet proposée par O'Sullivan et Bray (2004); Fraige et Langston (2004) comme étant plus stable pour la DEM.

6.3 Les systèmes à l'étude

Plusieurs travaux portent sur la vidange de silos et de trémies dans lesquels certaines données expérimentales et numériques sont présentes (Goda et Ebert, 2005; Choi et al., 2005; Hemph et al., 2006; Zhu et Yu, 2006; Hirshfeld et Rapaport, 2001). L'article de Choi et al. (2005) présente les profils de vitesse dans différentes sections du silo et des trémies de même que les courbes d'isovitesse dans un plan transversal. Une étude visant à déterminer une corrélation reliant l'ouverture de la fente W au bas du silo au débit total est également proposée. Cette corrélation pour le débit Q est similaire à celle proposée originalement par Beverloo et al. (1961) :

$$Q \propto (W - kd)^\alpha, \quad (6.10)$$

où d est le diamètre des particules, k et α sont des constantes. La corrélation de Beverloo et al. (1961) suggère $k = 1.4$ et $\alpha = 2.5$ dans le cas de silos cylindriques. Choi et al. (2005), quant à eux, ont montré que dans le cas de silos rectangulaires, la corrélation prend plutôt les paramètres $\alpha = 1.48 - 1.50$ et $k = 0.94 - 1.00$. Ces variations dans les paramètres sont justifiées par le fait que les mesures utilisées dans ce travail sont indirectes, les débits ne sont pas mesurés directement, mais plutôt déduits des profils de vitesses moyennes obtenus par vélocimétrie utilisant une caméra haute vitesse. Plusieurs réserves doivent être émises au sujet de ces résultats. Nous y reviendrons plus tard dans ce chapitre. Les silos et trémies à l'étude dans ce chapitre sont présentés à la figure 6.1, leur angle d'ouverture θ étant respectivement de 0, 30, 45 et 60 degrés. Ils ont une profondeur $D = 2.5$ cm, une largeur $L = 20$ cm. Deux tailles d'ouvertures de fentes sont étudiées, respectivement $W = 18.0$ mm et $W = 24.0$ mm afin de vérifier la corrélation de l'Eq. (6.10). Pour le silo, une troisième taille d'ouverture $W = 10.0$ mm est également étudiée afin de vérifier la corrélation proposée. Les paramètres du

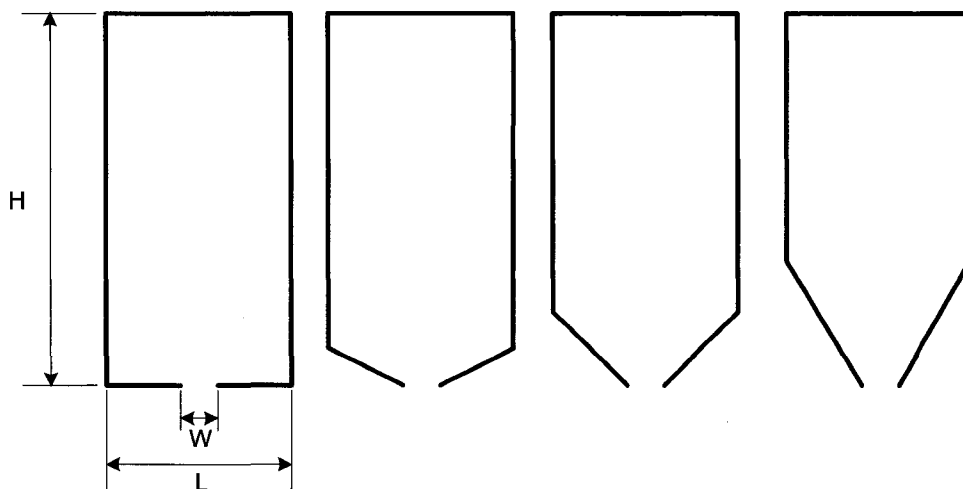


FIG. 6.1 – Silo et trémies étudiés dans ce chapitre. De gauche à droite : le silo, les trémies (30, 45 et 60 degrés d'ouverture).

modèle utilisés pour ces simulations sont présentés au tableau 6.1. Les paramètres de dissipation ont été déterminés afin d'obtenir un coefficient de restitution normal de $e = 0.88$ tel qu'utilisé dans Rycroft et al. (2006); Landry et al. (2003). De même, il s'agit d'une valeur correcte pour la restitution des billes de verre. Les calculs ont été effectués en utilisant 10 processeurs en parallèle.

6.4 Résultats et analyse

6.4.1 Champs de vitesses moyennes

Les champs de vitesses moyennes lors de la vidange des silos et trémies sont présentés. Les particules sont d'abord déposées dans les géométries afin qu'elles sédimentent et forment une structure aléatoire. Cette sédimentation prend environ 1 seconde de simulation. Ensuite, les trappes sous les géométries sont retirées afin de per-

TAB. 6.1 – Paramètres pour le modèle utilisé.

Parametre	Symbole	Valeur	Unités
Coefficient de frottement particule-particule	$\mu_{p,p}$	0.5	
Coefficient de frottement particule-mur	$\mu_{w,p}$	0.5	
Masse volumique	ρ	1500	kg/m ³
Diamètre des particules	r	3.0	mm
Nombre de Poisson	ν	0.2	
Constante de dissipation normale	c_n	0.03	
Constante de dissipation tangentielle	c_t	0.03	
Module de Young	E	4.87	MPa
Frottement de roulement	μ_r	2.5×10^{-5}	m
Pas de temps	h	1.0×10^{-6}	s
Nombre de processeurs		10	
Nombre de particules		55 000	

mettre aux particules de s'écouler par l'orifice.

Convention 1. *Les champs moyens présentés, sauf indications contraires, sont calculés :*

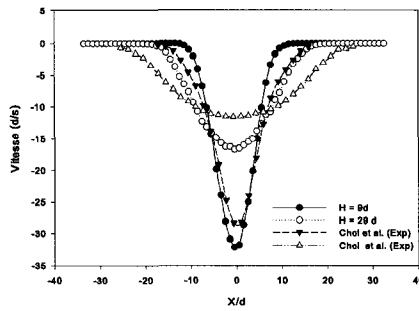
- *En considérant une épaisseur de matériel équivalent à deux diamètres de particules ($\delta_z/d = 2$),*
- *En observant le système 2 secondes après l'ouverture de la trappe,*
- *Durant une période de 5 secondes (300 points d'écriture).*

Cette convention provient du fait que la méthode expérimentale utilisée dans Choi et al. (2005) mesure principalement le champ de vitesse qui interfère avec la paroi et nous assumons que la méthode expérimentale ne tient pas compte du mouvement des particules à une distance supérieure à 2 diamètres de particules. Nous présentons également l'impact d'une telle erreur de mesure sur le profil réel de vitesse.

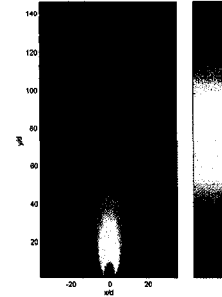
La figure 6.2 présente les profils de vitesses moyennes obtenus dans le silo avec des ouvertures $W = 16$ mm et 24 mm. Les figures 6.3, 6.4 et 6.5 présentent ces mêmes profils pour les trémies. La relation entre le débit et l'ouverture de la fente est présentée à la figure 6.6. On voit bien que le débit suit la corrélation proposée avec $\alpha = 1.59$ ($R^2 = 1.00$). Ceci est différent de l'exposant proposé par Choi et al. (2005) $\alpha = 1.48 - 1.50$ avec un écart de 6.0%. Dans la limite des résultats de Choi et al. (2005) (i.e. $W/d - 1 = 8$)[†], ceci équivaut à une surestimation du débit de 20.5%. Le tableau 6.2 présente un résumé des résultats obtenus pour le silo et les trémies. Afin de permettre une comparaison avec les résultats de Choi et al. (2005), la vitesse moyenne v^* est également présentée. Cette vitesse moyenne est calculée par :

$$v^*(y) = \frac{1}{L} \int_0^L v(x, y) dx, \quad (6.11)$$

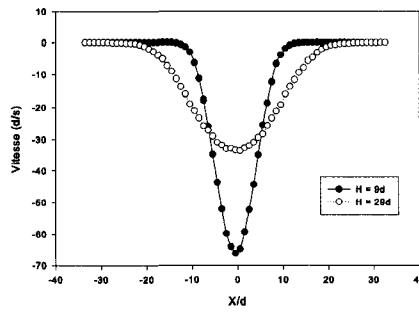
[†]Choi et al. utilise comme critère de corrélation la valeur de $W/d-1$. C'est pourquoi cette valeur est utilisée pour fins de comparaisons.



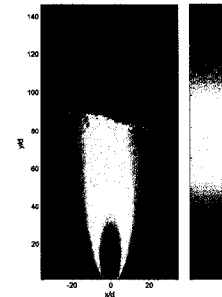
(a)



(b)



(c)



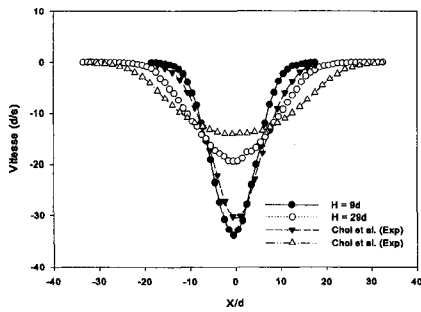
(d)

FIG. 6.2 – Silo $\theta = 0^\circ$. (a)-(b) Vitesses dans les sections à $H/d = 9$ et $H/d = 29$ et courbes d'isovitesse verticale pour $W = 16$ mm. (c)-(d) $W = 24$ mm.

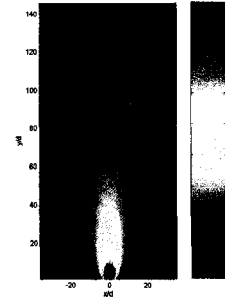
où $v(x, y)$ est le profil de vitesse verticale (i.e. la composante dans la direction de la gravité) à la hauteur $H = y$. Puisqu'il y a conservation de matière, nous avons

$$Q = \rho(x, y, z) v^*(y) \quad (6.12)$$

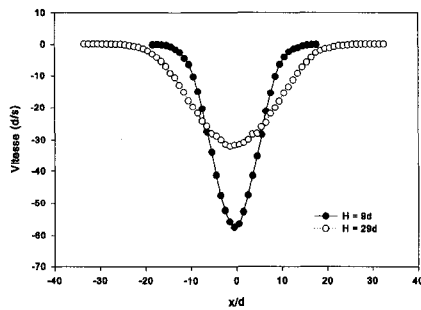
pour tout $y_0 < y < y_{max}$. Dans notre travail, nous avons calculé v^* à la hauteur $y/d = 29$ afin d'éviter de mesurer les fluctuations liées à la fente de décharge pour des valeurs de y plus faibles. Les vitesses moyennes expérimentales, v_{exp}^* sont quant à elles calculées à l'aide de la corrélation $v_{exp}^* = 0.63(W/d - 1)^{1.48}$ dans le cas du silo $\theta = 0^\circ$. Pour les autres géométries, elles sont obtenues, lorsque disponibles, de la figure 6b de



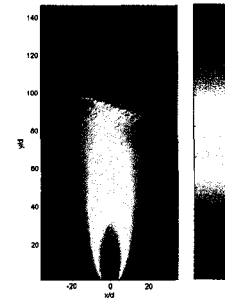
(a)



(b)



(c)

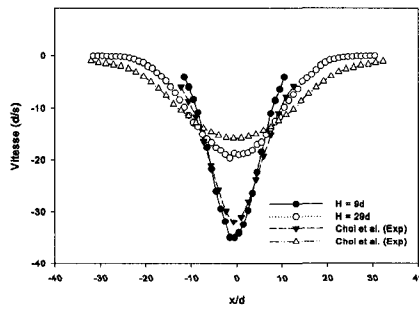


(d)

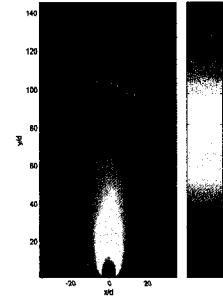
FIG. 6.3 – Trémie $\theta = 30^\circ$. (a)-(b) Vitesses dans les sections à $H/d = 9$ et $H/d = 29$ et courbes d'isovitesse verticale pour $W = 18$ mm. (c)-(d) $W = 24$ mm.

Choi et al. (2005).

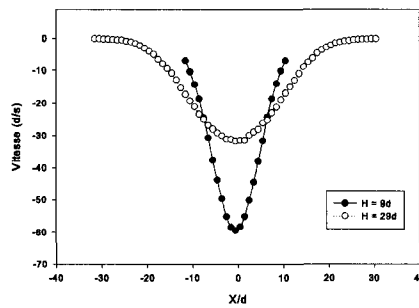
L'épaisseur de matériel $\delta_z = 2d$ dans la direction z considérée pour le calcul de la vitesse moyenne v^* a un effet considérable lié à la présence d'un profil de vitesse dans la direction z , i.e. $v(x, y) = v(x, y, z)$. Dans le cas de la trémie $\theta = 60^\circ$ et $W/d = 24$, la figure 6.7 montre clairement cet effet (profil à $x/d=0$). Ce profil est dû à la présence de parois. Il est intéressant de remarquer que ce profil adopte une forme relativement plane à une distance supérieure à 2 diamètres de particules pour toutes les hauteurs de silo. Ceci laisse donc croire, à la lumière des résultats numériques, que la méthode expérimentale de Choi et al. (2005) mesure incorrectement le profil de vitesse des par-



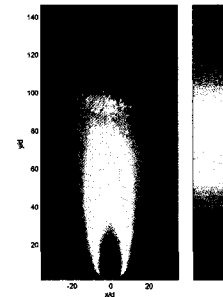
(a)



(b)



(c)

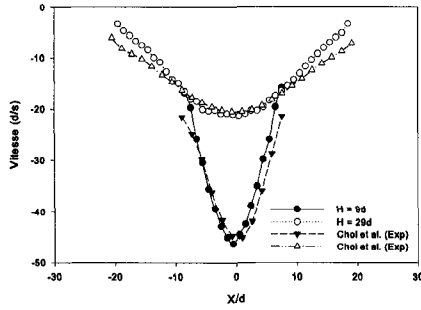


(d)

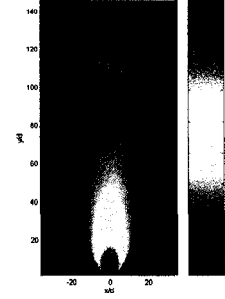
FIG. 6.4 – Trémie $\theta = 45^\circ$. (a)-(b) Vitesses dans les sections à $H/d = 9$ et $H/d = 29$ et courbes d'isovitesse verticale pour $W = 18$ mm. (c)-(d) $W = 24$ mm.

ticules et que le choix d'utiliser $\delta_z/d = 2$ pour le calcul des profils de vitesse est justifié pour fins de comparaisons. L'écart plus important entre les résultats expérimentaux de Choi et al. (2005) est relié au choix des paramètres et fait l'objet de la section 6.4.3.

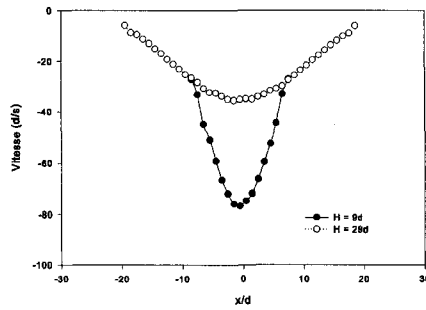
Dans les simulations, la vidange du silo et des trémies entraîne la formation d'une pile due à l'accumulation des particules. La figure 6.8 présente deux exemples de ces piles. Deux angles de repos peuvent être mesurés : l'angle de la pile et l'angle de la surface libre dans la trémie lors de la décharge. L'angle de la pile est de $\theta = 28^\circ \pm 1^\circ$ et l'angle de la surface libre est environ $\theta = 29^\circ \pm 1^\circ$.



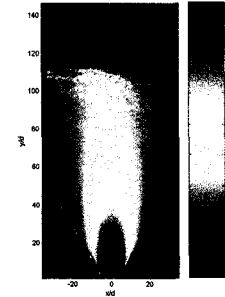
(a)



(b)



(c)



(d)

FIG. 6.5 – Trémie $\theta = 60^\circ$. (a)-(b) Vitesses dans les sections à $H/d = 9$ et $H/d = 29$ et courbes d'isovitesse verticale pour $W = 18$ mm. (c)-(d) $W = 24$ mm.

6.4.2 Vérification avec Rycroft et al. (2006)

Dans l'article de Rycroft et al. (2006), un silo avec des dimensions différentes est utilisé. Le silo a une largeur $L = 15$ cm, une épaisseur de 2.4 cm. L'orifice au fond du silo n'est pas une fente rectangulaire, mais un trou circulaire d'un diamètre de 2.4 cm. Les paramètres de la simulation sont identiques à ceux présentés au tableau 6.1 sauf pour la valeur de la dureté. Puisque leur modèle est légèrement différent, (i.e. la force de contact normal est donnée par $-k_n d^{-\frac{1}{2}} \delta_n^{3/2}$), nous avons utilisé une valeur du module de Young qui se rapproche le plus de la valeur de $k_n = 2 \times 10^5 \text{ mg/d}$. De même, afin de conserver la même valeur du coefficient de restitution, le paramètre c_n a été ajusté à

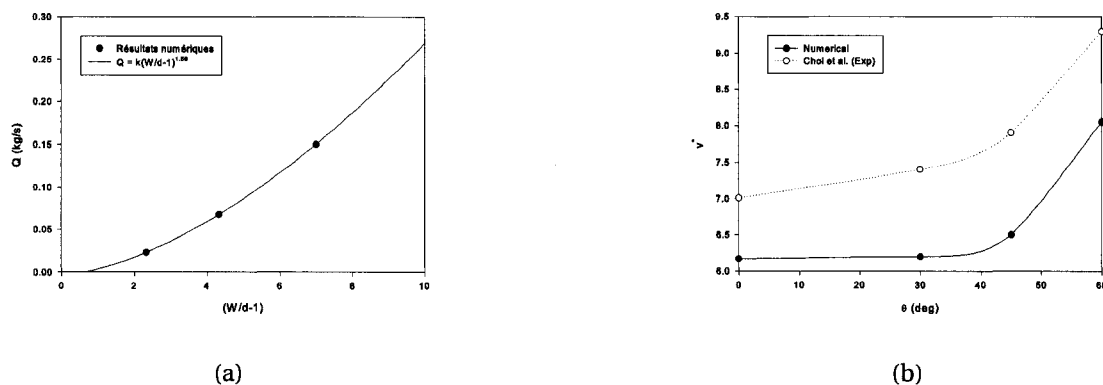


FIG. 6.6 – (a) Débit massique à la sortie du silo ($\theta = 0$) en fonction de l'ouverture de la fente W . (b) v^* en fonction de l'angle de la trémie.

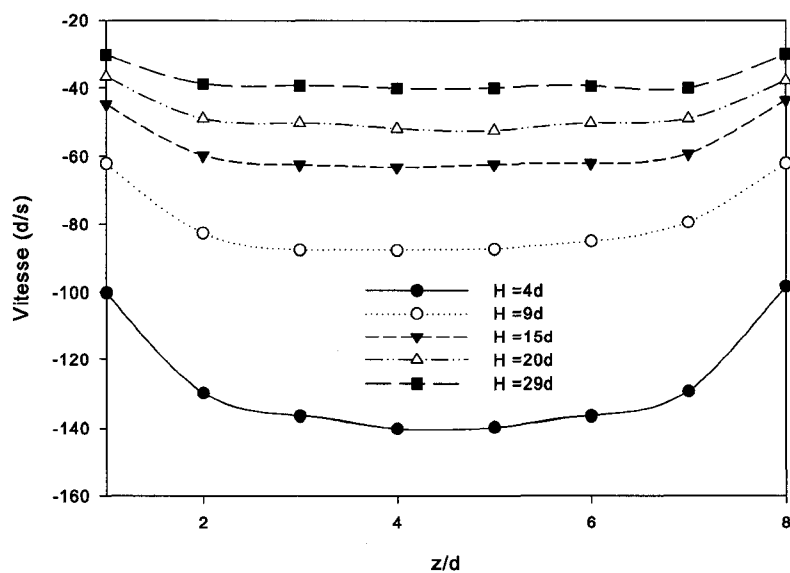


FIG. 6.7 – Profil de vitesses moyennes (composante verticale) dans une section transversale ($x/d=0$) dans la trémie $\theta = 60^\circ$ et $W=24\text{mm}$.

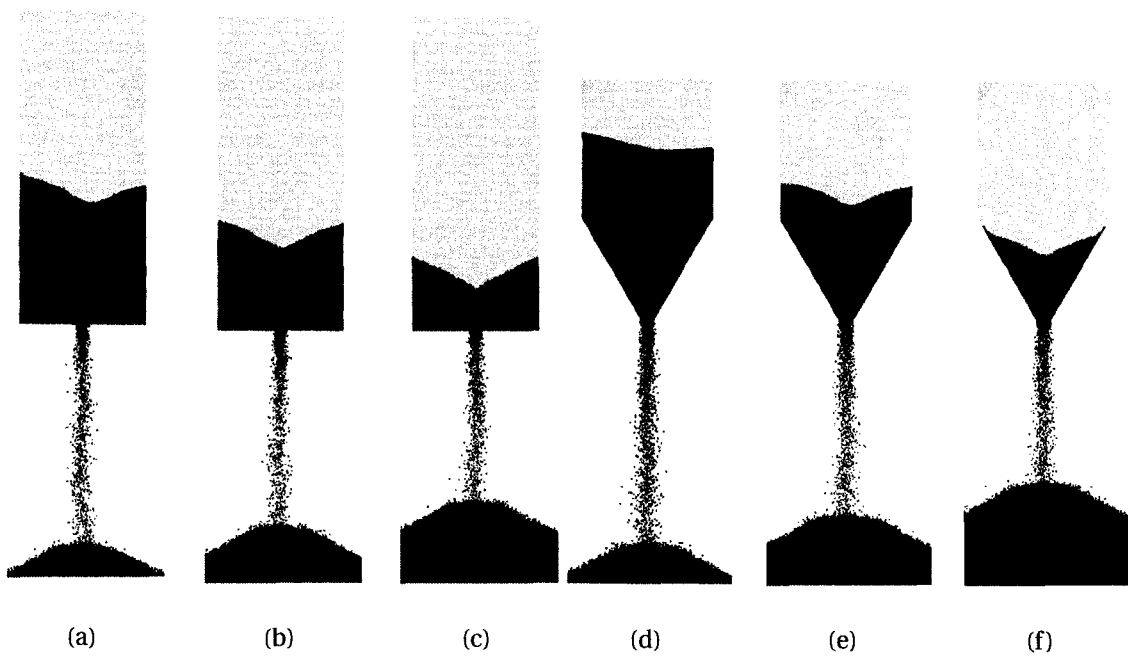


FIG. 6.8 – (a)-(c) Évolution de la vidange du silo $\theta = 0^\circ$ et $W=24$ mm. (a) $t=1.68$ s, (b) $t=3.35$ s, (c) $t=5.01$ s, (d)-(f) Vidange de la trémie $\theta = 60^\circ$ et $W=24$ mm : (d) $t=1.68$ s (e) $t=3.35$ s, (f) $t=5.01$ s.

TAB. 6.2 – Débits obtenus pour chaque silo et trémie.

θ	W/d	Q_{DEM} (kg/s)	v_{DEM}^* (d/s)	v_{exp}^* (d/s)	Erreur (%)
0°	3.3	0.0229	1.46	2.16	-32.4
	5.3	0.0678	4.75	5.45	-12.8
	8.0	0.1501	11.1	11.2 [†]	-0.9
30°	6.0	0.0870	6.20	7.4	-16.2
	8.0	0.1486	10.6	-	-
45°	6.0	0.0951	6.71	7.9	-15.1
	8.0	0.1597	11.4	-	-
60°	6.0	0.1120	8.05	9.3	-13.4
	8.0	0.1855	13.4	-	-

[†] Résultats obtenus à l'aide de la corrélation Choi et al. (2005).

la valeur présentée au tableau 6.1.

Le débit trouvé par Rycroft et al. (2006) est de 4440 particules par seconde. Le débit obtenu dans notre simulation est de 3894 particules par seconde (écart de -11.1 %). Les profils de vitesses obtenus sont présentés à la figure 6.9. Les vitesses sont légèrement plus faibles dans le cas de nos simulations (erreur maximale de -10%), mais particulièrement dans la zone haute du silo. Près de l'ouverture, les profils sont très similaires. Néanmoins, ces différences dans les vitesses entraînent nécessairement une évolution différente du déplacement du solide, tel que présenté à la figure 6.10 où les bandes colorées se déplacent moins vite dans notre cas.

Plusieurs hypothèses sont étudiées pour déterminer la cause de cet écart, dont notamment la différence dans le pas de temps utilisé. Dans Rycroft et al. (2006), une valeur de $h = 1.75 \times 10^{-6}$ est utilisée alors qu'elle est de $h = 1.0 \times 10^{-6}$ dans ce travail.

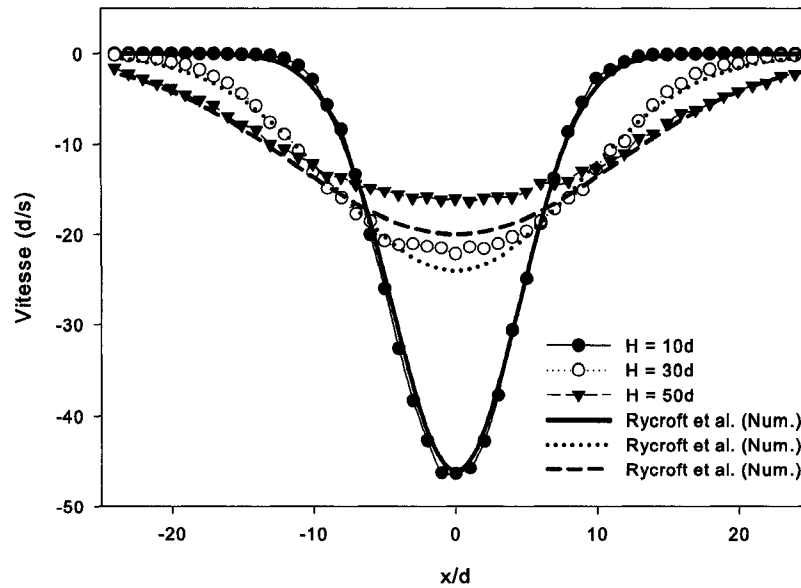


FIG. 6.9 – Comparaison avec les résultats de Rycroft et al. (2006)

Nous montrerons dans le chapitre suivant qu'il n'y a pas de différences significatives entre un pas de temps de $h = 1.0 \times 10^{-6}$ s et $h = 1.75 \times 10^{-6}$ en ce qui concerne les profils de vitesses.

6.4.3 Effet du coefficient de friction

Dans cette section, nous nous demandons si le coefficient de friction interparticulaire $\mu_{p,p}$ et celui avec les parois $\mu_{w,p}$ jouent un rôle dans l'écart obtenu avec les résultats expérimentaux présentés à la section 6.4.1. En effet, il n'y a pas d'information au sujet des propriétés des billes de verre utilisées dans Choi et al. (2005), mais une discussion avec les auteurs nous permet de croire que le coefficient de frottement peut être inférieur à 0.5, tel que relevé dans la littérature. Dans l'article de Li et al. (2005), le coefficient de frottement verre-verre a été déterminé afin de l'utiliser avec la

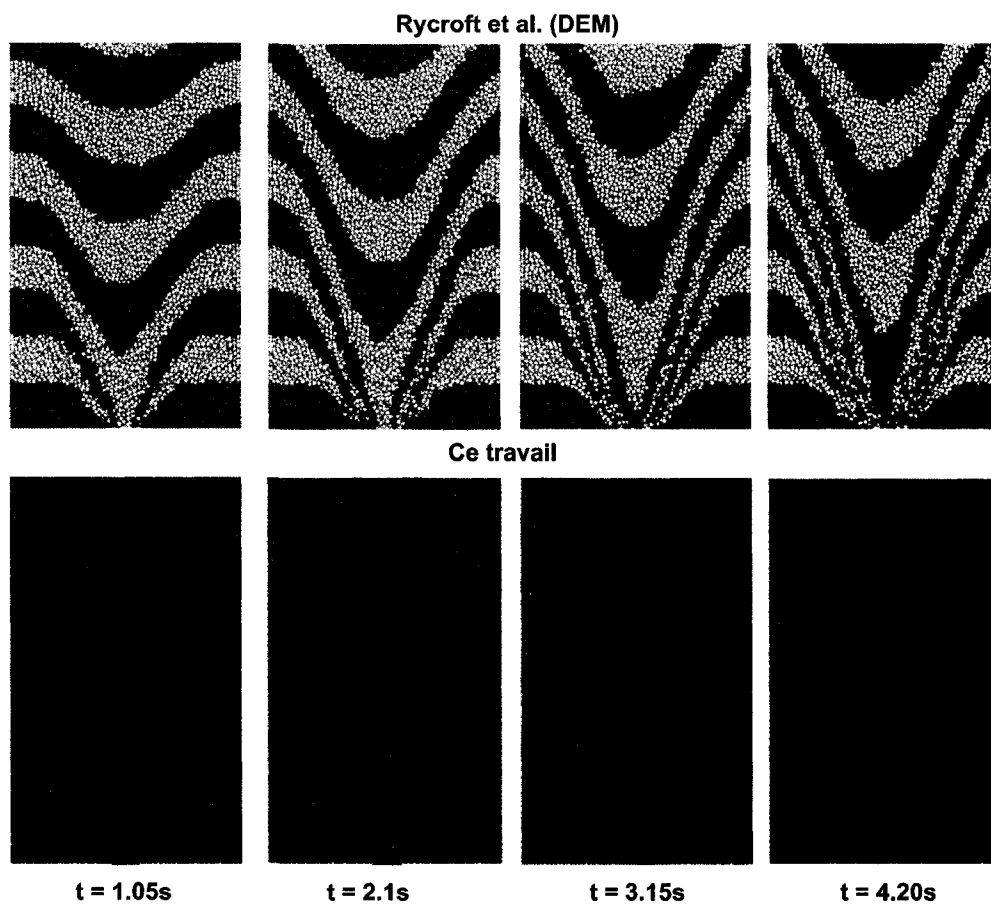


FIG. 6.10 – Vidange du silo. Comparaison avec les résultats de Rycroft et al. (2006). Puisque les vitesses sont plus faibles dans notre cas, les bandes se déplacent plus lentement.

DEM. Nous utiliserons la valeur expérimentale qu'ils ont trouvée, $\mu = 0.1545$. Néanmoins, il existe une vaste littérature de simulations numériques utilisant la DEM avec des billes de verre qui utilisent des coefficients de frottement différents $0.1 < \mu < 0.8$, sans toutefois spécifier la source expérimentale de ces données, ni la méthodologie expérimentale permettant d'obtenir celle-ci. On peut s'en convaincre en référant, par exemple à (Zhou et al., 1999; Masson et Martinez, 2000; Rycroft et al., 2006; Hirshfeld et Rapaport, 2001; Sanad et al., 2001; Hemph et al., 2006; Goda et Ebert, 2005; Sudah, 2001; Moakher et al., 2000; Lemieux et al., 2006; Bertrand et al., 2005). Dans Li et al. (2005), une cellule de frottement permet de mesurer la force de frottement avec différentes charges. Dans le cas du verre, une plaque de verre faite du même matériel que celui composant les particules recouvre une des surfaces alors que des particules de verre sont fixées sur l'autre surface.

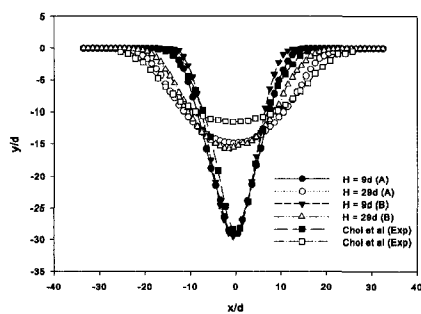
On peut souligner au passage que la valeur du coefficient de friction obtenue à l'aide de cellules de frottement semble généralement surestimée. En utilisant différentes valeurs de coefficients de friction dans le modèle de DEM, on peut reproduire les résultats expérimentaux dans les cas de décharge de silo par exemple, mais en utilisant des valeurs du coefficient de friction plus faibles que celles mesurées par les cellules de friction. L'hypothèse émise à ce sujet est que les cellules de friction mesurent un coefficient de friction lié à l'assemblage plutôt qu'aux particules. Il faut donc être prudent lors de l'utilisation de ces cellules pour obtenir les paramètres physiques d'un système granulaire.

Dans un premier cas (A), nous avons fixé $\mu_{w,p} = \mu_{p,p} = 0.1545$. Les figures 6.11-6.14 présentent les résultats obtenus. Le profil de vitesse est nettement plus près des résultats expérimentaux obtenus par Choi et al. (2005) dans le cas du silo et de la trémie $\theta = 30^\circ$. Néanmoins, le tableau 6.2 montre que les valeurs de v^* s'éloignent da-

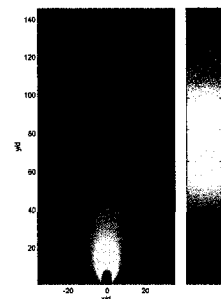
vantage de ces résultats pour les valeurs de $\theta = 45^\circ - 60^\circ$. Nous pensons que ceci est dû aux effets de parois qui sont plus importants dans ces conditions et que, en raison de la faible valeur du coefficient de frottement paroi-particules $\mu_{w,p}$, ces derniers pourraient avoir un rôle significatif dans cet écart pour les valeurs élevées de θ . Ceci est aussi motivé par le fait que le profil de vitesse s'écarte davantage dans la zone de contraction où les parois interfèrent particulièrement avec le champ de vitesse. On observe cette interaction sur les courbes d'isovitesse et particulièrement pour les valeurs de $\theta = 30^\circ$ et $\theta = 60^\circ$.

Pour nous en convaincre, nous avons étudié un deuxième cas (B) où nous avons fixé $\mu_{p,p} = 0.1545$ et $\mu_{w,p} = 0.5$. Nous observons que si les prédictions de v^* (tableau 6.2) s'améliorent, il en est autrement pour les profils de vitesse. En fait, une diminution de la valeur de $\mu_{w,p}$ semble refermer le profil de vitesse (c.f. Figures 6.11-6.14). Néanmoins, les valeurs maximales des profils ne concordent que moyennement. Nous pouvons donc conclure que :

1. Les coefficients de friction $\mu_{w,p}$ et $\mu_{p,p}$ jouent un rôle déterminant dans la forme du profil de vitesse dans le silo et les trémies : en augmentant ces paramètres, les vitesses moyennes diminuent.
2. Le modèle est sensible à ces paramètres. Toutefois, ne disposant pas de données expérimentales précises, leur choix peut devenir difficile. De plus, ces coefficients sont-ils stationnaires, isotropes ? Suivent-ils une distribution ? Il est donc difficile de déterminer le véritable lien physique entre ces paramètres et la dynamique des particules, principalement en raison d'un manque de connaissance du paramètre.

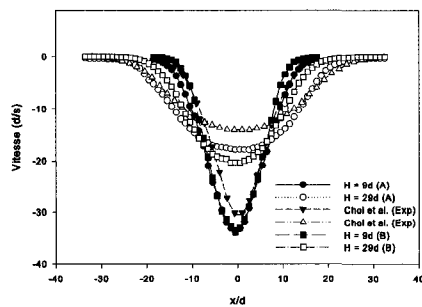


(a)

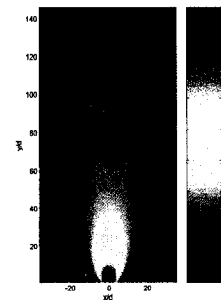


(b)

FIG. 6.11 – Silo $\theta = 0^\circ$ pour les cas (A) et (B). (a) Vitesses dans les sections à $H/d = 9$ et $H/d = 29$. (b) Courbes d'isovitesse verticale pour $W = 16$ mm (cas A).

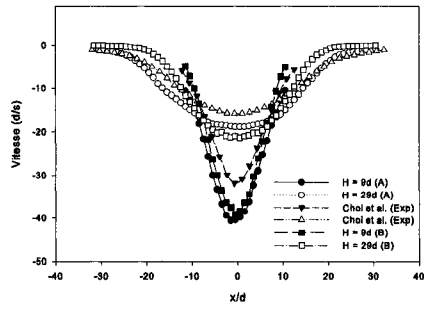


(a)

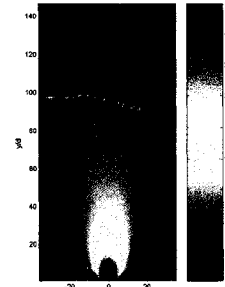


(b)

FIG. 6.12 – Trémie $\theta = 30^\circ$ pour les cas (A) et (B). (a) Vitesses dans les sections à $H/d = 9$ et $H/d = 29$. (b) Courbes d'isovitesse verticale pour $W = 18$ mm (cas A).

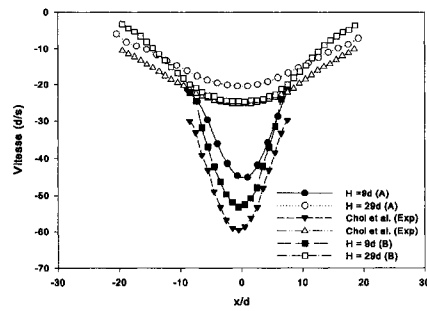


(a)

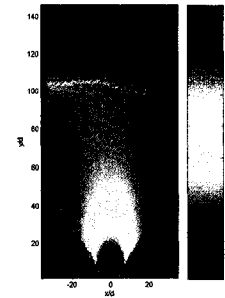


(b)

FIG. 6.13 – Trémie $\theta = 45^\circ$ pour les cas (A) et (B). (a) Vitesses dans les sections à $H/d = 9$ et $H/d = 29$. (b) Courbes d'isovitesse verticale pour $W = 18$ mm (cas A).



(a)



(b)

FIG. 6.14 – Trémie $\theta = 60^\circ$ pour les cas (A) et (B). (a) Vitesses dans les sections à $H/d = 9$ et $H/d = 29$. (b) Courbes d'isovitesse verticale pour $W = 18$ mm (cas A).

TAB. 6.3 – Débits obtenus pour chaque trémie dans les cas (A) et (B).

θ	W/d	Cas	ν_{DEM}^* (d/s)	ν_{exp}^* (d/s)	Erreur (%)
0°	5.3	A	5.94	5.45	+9.0
	5.3	B	5.23	5.45	-4.0
	8.0	B		11.2 [†]	
30°	6.0	A	8.02	7.4	+8.4
	6.0	B	6.96	7.4	-5.9
	8.0	B			
45°	6.0	A	9.15	7.9	+15.8
	6.0	B	7.66	7.9	-3.0
	8.0	B	-	-	-
60°	6.0	A	11.3	9.3	+21.5
	6.0	B	9.3	9.3	0.0
	8.0	B	14.8 -	-	-

[†] Résultats obtenus à l'aide de la corrélation Choi et al. (2005).

6.5 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté le modèle théorique à la base de la méthode des éléments discrets tel qu'il est actuellement implanté dans le code que nous utilisons. Deux aspects fondamentaux ont été abordés. D'abord une vérification avec les résultats numériques obtenus par Rycroft et al. (2006) visant à nous assurer de la validité, dans la limite des cas étudiés, de l'implantation du modèle. Cette vérification ne permet pas de déterminer si le modèle est valide, mais permet d'établir qu'il se compare très correctement aux autres codes de calcul actuellement disponibles dans le domaine.

D'autre part, nous avons entamé une procédure de validation visant à confronter les résultats numériques obtenus avec la DEM avec ceux obtenus expérimentalement dans des conditions exactement similaires géométriquement. Les paramètres des particules et certaines propriétés physiques n'étant pas disponibles, une gamme de paramètres a été utilisée afin de déterminer s'il est possible de retrouver les résultats expérimentaux avec une combinaison appropriée. Cette analyse nous a menés aux observations suivantes :

- Il existe une combinaison de paramètres qui permettent de retrouver les résultats expérimentaux (profils de vitesses moyennes),
- Il existe une forte sensibilité du modèle aux coefficients de frottement (paroi-particule, particule-particule),
- Les différentes géométries de trémies et silo permettent d'isoler l'effet des coefficients de frottement particule-particule et particule-parois.

La dernière observation permet de considérer la possibilité d'établir une méthodologie de mesure, utilisant différentes formes de trémies et silos, permettant de mesurer *in situ* les coefficients de frottement particule-particule et particule-paroi, qui sont si

difficiles à obtenir par d'autres moyens, et qui ont un impact significatif sur les résultats. Dans le prochain chapitre, nous allons, en particulier, montrer que ce paramètre est particulièrement sensible puisqu'il fait partie des variables véritablement indépendantes du système, ce qui n'est pas le cas de la masse volumique, du coefficient de dissipation et du module de Young par exemple.

Chapitre 7

Analyse d'erreur et analyse dimensionnelle

7.1 Contexte

[†] Le choix d'un pas de temps approprié pour les simulations utilisant la DEM est une question que très peu de travaux ont traitée. Pendant que la plupart des articles soutiennent qu'il existe un pas de temps au-delà duquel la solution diverge absolument en raison de la nature explicite de la méthode, nous n'avons aucune indication sur la précision et la consistance des solutions obtenues avec des pas de temps relativement élevés. Cette question est cruciale pour plusieurs raisons, dont une raison pratique voulant que la majorité des travaux publiés à ce jour impliquant la DEM utilisent le pas de temps le plus élevé possible afin de réduire au maximum le temps re-

[†]Ce chapitre a été publié en partie dans J. Doucet, J. Maille, F. Bertrand and J. Chaouki, *Effect of time integration error on accuracy of granular mixing simulations with the discrete element method*, Compte-rendu de conférence de Partec 2007, Nuremberg, Allemagne, Avril 2007.

quis pour obtenir la solution et ainsi réduire l'effort de calcul. Dans ce chapitre, nous allons montrer que cette stratégie est inconsistante et qu'elle mène à des erreurs sur plusieurs aspects de l'écoulement obtenu, même à l'échelle macroscopique du mélange. En particulier, nous allons montrer que le pas de temps affecte les champs de vitesses moyennes et de fluctuations, la période d'autocorrélation et la courbe de mélange. De même, des résultats précédents ont montré que les erreurs de modélisation, d'intégration et les erreurs d'arrondis jouent un rôle majeur sur le mélange de fluides en affectant les temps de circulation (Souvaliotis et al., 1995). Ce chapitre vise à présenter des résultats originaux qui démontrent la sensibilité de plusieurs caractéristiques au pas de temps dans le contexte de simulations impliquant des matériaux granulaires.

En comparaison avec la littérature du mélange liquide, très peu d'articles proposent une discussion sur l'erreur d'intégration de la DEM, le problème étant principalement lié au fait qu'il n'existe pas de solution analytique pour un système à plusieurs corps en mouvement avec laquelle la solution numérique peut être comparée. Il devient alors difficile de quantifier le niveau de précision de la méthode. Dans O'Sullivan et Bray (2004), des instabilités numériques sont observées dans un système composé de particules en compression. De manière similaire, dans Fraige et Langston (2004), des collisions binaires sont simulées et le niveau de précision de différents algorithmes d'intégration est déterminé en comparant les trajectoires numériques et analytiques. Néanmoins, ces travaux présentent des données qui montrent que la dynamique locale est affectée par le pas de temps (ce que l'on est en mesure de croire intuitivement), mais il est difficile d'utiliser ces résultats pour déterminer si cette erreur locale a un impact significatif sur le comportement macroscopique. Récemment, Hemph et al. (2006); Zhu et Yu (2006) soutenaient dans un congrès que, sur la base du

débit massique à la sortie d'un silo, la solution obtenue était très peu sensible au pas de temps. Dans ce chapitre, nous allons montrer qu'au contraire, au-delà d'un certain seuil de pas de temps, la solution obtenue dans ce contexte est complètement inconsistante et que, bien au-delà du débit massique, les champs de vitesse et de fluctuation sont fortement affectés.

7.2 Vidange d'un silo

Afin d'illustrer l'effet du pas de temps sur l'écoulement granulaire, nous allons d'abord étudier un cas de vidange d'un silo présenté au chapitre précédent. Les dimensions du silo sont rigoureusement identiques à celles présentées dans Rycroft et al. (2006). Ceci permettra également de comparer nos résultats aux leurs. Les propriétés des particules sont présentées au tableau 6.1 et sont encore une fois similaire à celles présentées dans Rycroft et al. (2006). La figure 7.2 présente les profils de vitesse verticale moyenne à différentes hauteurs (y) le long du silo. Ces profils sont calculés à partir de la solution obtenue avec différents pas de temps. Cette vitesse, notée $v^*(y)$, est précisément calculée par :

$$v^*(y) = \frac{1}{L} \int_0^L v_y(x, y) dx, \quad (7.1)$$

où L est la largeur du silo et $v_y(x, y)$ est la composante selon y (descendante) de la vitesse moyenne. Le graphe de $v^*(y)$ est présenté à la figure 7.1. À partir de ces résultats, il apparaît clair que la solution est affectée par le pas de temps. De plus, la solution converge vers des valeurs stables pour des pas de temps décroissants. Cette figure montre également que l'écoulement près de l'orifice (qui est un moyen commun pour calculer le débit massique hors du silo) est sensible au pas de temps. Pour $h = 1.00 \times 10^{-7}, 1.00 \times 10^{-6}, 1.00 \times 10^{-5}, 2.50 \times 10^{-5}, 5.00 \times 10^{-5}$, le débit (particule/s)

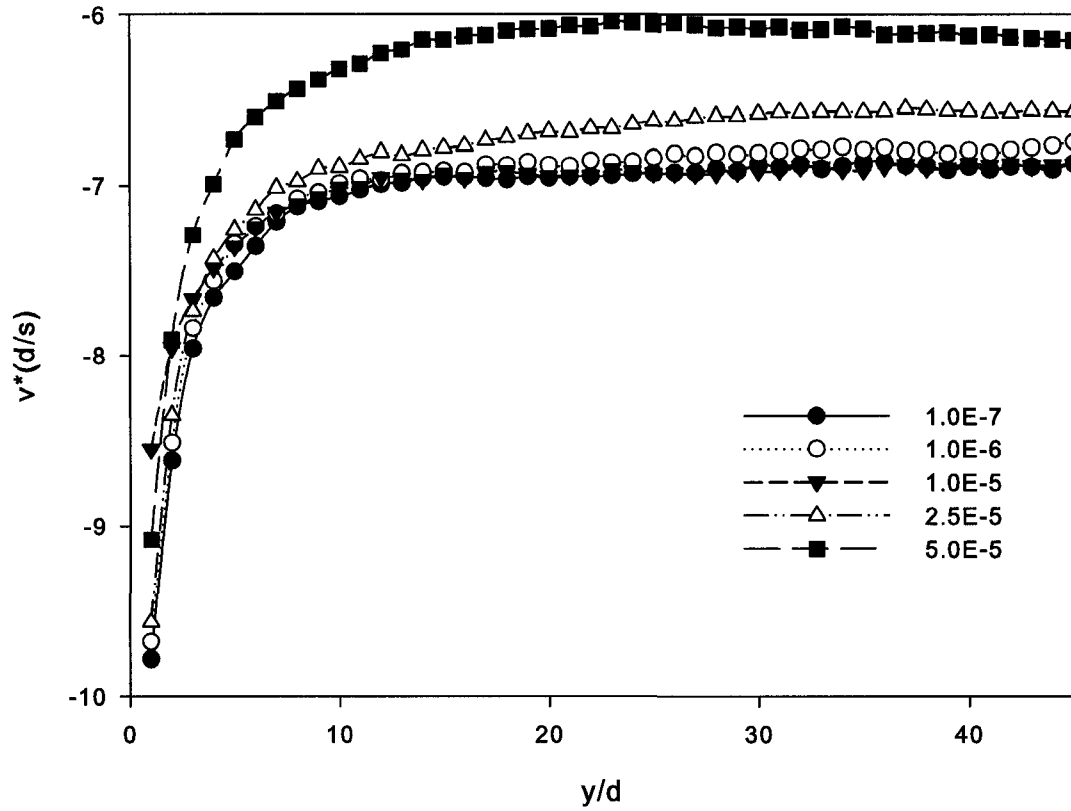


FIG. 7.1 – Vitesse descendante moyenne $v^*(y)$ en fonction de la hauteur du silo y/d pour différentes valeurs de pas de temps.

est 3894, 3912, 3933, 3928, 3710 respectivement.

À partir des figures 7.2(a)-7.2(b), nous pouvons observer que les résultats obtenus dans Rycroft et al. (2006) avec un pas de temps de $h = 2.5 \times 10^{-6}$ s et sont en accord avec nos résultats.

Considérons les vitesses instantanées des particules données par $\mathbf{v}(x, y) = \bar{\mathbf{v}}(x, y) + \mathbf{v}'(x, y)$, où $\bar{\mathbf{v}}$ est la vitesse moyenne et \mathbf{v}' est la fluctuation par rapport à la vitesse

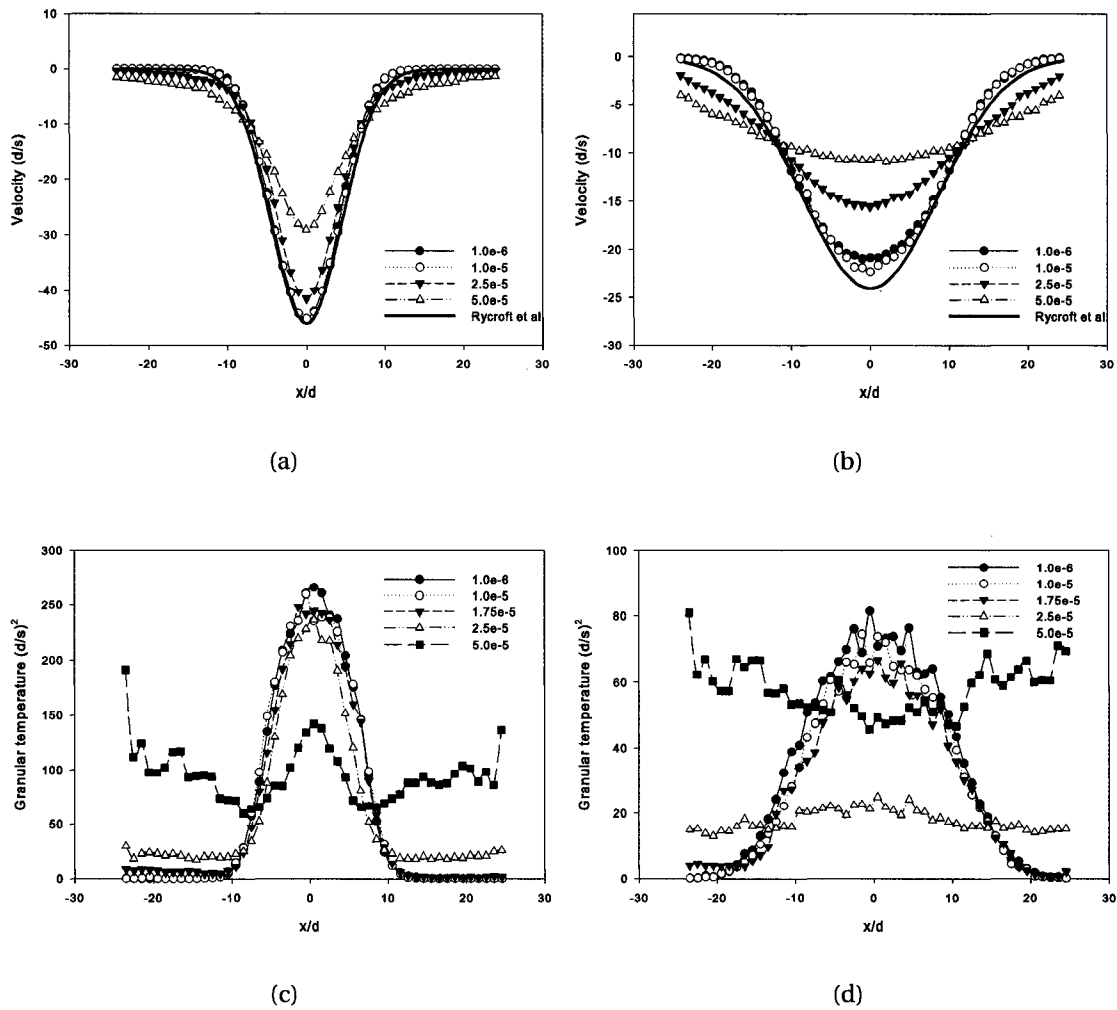


FIG. 7.2 – Haut : effet du pas de temps h sur le profil de vitesse moyenne descendante à différentes hauteurs dans le silo : (a) $y/d=9$; (b) $y/d=29$. Bas : Effet sur les profils de fluctuations de vitesse (c) $y/d=9$, (d) $y/d=29$.

moyenne. La température granulaire définie par (Smith, 2001)

$$\mathbf{T}^*(x, y) = \langle \mathbf{v}'^2(x, y) \rangle, \quad (7.2)$$

correspond à la variance des vitesses. Plusieurs autres définitions existent en introduisant un facteur multiplicatif devant le terme (Smith, 2001). Les figures 7.2(c)-7.2(d) révèlent qu'une valeur inappropriée du pas de temps (i.e. trop grande) augmente la température granulaire, particulièrement dans les régions à faible gradient de vitesse (faible nombre de Savage)[†]. De plus, les fluctuations sont corrélées avec le module de la force de contact agissant sur les particules. Plus la pression est élevée, plus les fluctuations semblent amplifiées. Ceci provient de la nature inconditionnellement stable de l'algorithme d'intégration qui permet à la solution d'osciller quand les termes de contact deviennent trop grands dans les équations 6.8-6.9. En fait, dans l'algorithme HSLV présentée par O'Sullivan et Bray (2004)[‡], la vitesse au temps $t + h$ est donnée par :

$$\mathbf{v}\left(t + \frac{h}{2}\right) = \mathbf{v}\left(t - \frac{h}{2}\right) + \mathbf{a}(t)h, \quad (7.3)$$

$$\mathbf{x}(t + h) = \mathbf{x}(t) + \mathbf{v}\left(t + \frac{h}{2}\right)h, \quad (7.4)$$

$$\mathbf{v}(t + h) = \mathbf{v}\left(t + \frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t)h, \quad (7.5)$$

où $\mathbf{a}(t)$ est le terme d'accélération $\mathbf{a}(t) = \mathbf{F}(t)/m$, où $\mathbf{F}(t)$ est le vecteur de force totale

[†]Le nombre de Savage est défini par $Sa = \frac{\rho d^2 (du/dy)^2}{p_T}$, où ρ , d , p_T sont la masse volumique, le diamètre et la contrainte normale respectivement. Il est possible d'approximer la contrainte normale dans un assemblage de particules par $p_T = (1 - \phi)\rho g H$, avec ϕ la fraction de vide et H la hauteur de l'assemblage de particules.

[‡]Cette forme HSLV n'est pas la véritable forme HSLV puisqu'elle ne contient pas de terme de prédiction. Cette appellation a été néanmoins introduite et utilisée par O'Sullivan et Bray (2004) et nous allons nous référer à cette forme pour le reste de ce chapitre

agissant sur la particule au temps t . À partir des Eqs. 7.3-7.4, le calcul $v(t)$ devient du premier ordre par rapport à h .

Afin de fournir une discussion sur l'effet du pas de temps h sur le profil de fluctuations de vitesse, nous allons supposer que la force totale qui agit sur la particule est proportionnelle à la tête hydrostatique ou pression à une hauteur y donnée par $p_T \propto (1 - \phi)\rho g(H - y)$, où H est la hauteur totale de solide et ϕ la fraction de vide dans l'assemblage de particules. Supposons maintenant que la position de la particule oscille autour d'un point fixe. Ceci implique alors que $v(t + h) = -v(t)$ et $v(t + h/2) = 0$ puisque la vitesse change de signe entre t et $t + h$. Puisque le schéma est d'ordre 1 alors la vitesse à $t + h/2$ est nulle. Ainsi, selon l'Eq. 7.5, nous obtenons $-2v(t) = a(t)h$. Maintenant fixons la période d'oscillation à $2h$, qui signifie que la particule oscille d'une vitesse à l'autre, d'une itération à l'autre.

Posons maintenant que la vitesse d'une particule en oscillation est donnée par $v(t) = kPh \cos(\frac{\pi t}{h})$ où $k > 0$. On peut remarquer que l'amplitude de l'oscillation est linéaire selon h et que la vitesse change de signe sur une période correspondant à h tel que fixé plus haut. De plus, si on calcule la variance de la vitesse, nous obtenons la température granulaire

$$\langle v^2(y) \rangle = (kPh)^2 \frac{\int_0^h \cos^2\left(\frac{\pi t}{h}\right) dt}{\int_0^h dt} \quad (7.6)$$

$$= K(H - y)^2 h^2, \quad (7.7)$$

avec $K > 0$. Ceci signifie que la variance varie comme le carré de $(H - y)$ et h . Ce comportement est mis en évidence par les figures 7.2(c) et 7.2(d) où il est évident que dans l'intervalle $5.0 \times 10^{-5} s > h > 1.0 \times 10^{-5} s$, la température granulaire suit un comportement en h^2 dans la zone statique. La température granulaire présente aussi, dans cette région, le comportement en $(H - y)^2$ pour les cas $y/d = 9$ et 29 , ce qui correspond à

$(H - y)/d = 111$ et 91 respectivement. On voit en fait que le rapport des températures granulaires pour une valeur constante de x/d est environ $1.2 - 1.6$ alors que le ratio des valeurs de $(H - y)^2$ est 1.49 .

Nous pouvons aussi nous demander si les instabilités peuvent aussi être causées par le bilan angulaire ainsi que par la composante tangentielle de la force. À partir de l'Eq. 6.9, en raison du produit vectoriel, seule la composante tangentielle de la force contribue au bilan angulaire. Nous savons que la norme de la force tangentielle est nécessairement plus faible que celle de la force normale en raison du critère de Coulomb (puisque $F_t = \mu F_n$ pour $\mu < 1$). En supposant que la vitesse angulaire de la particule contient aussi un terme de fluctuation ω' , nous nous attendons à ce que le produit $\omega' r$, qui représente la fluctuation de vitesse angulaire à la surface de la particule, soit plus faible que dans la direction normale. Finalement, puisque ces termes s'additionnent dans le bilan total de force pour la particule (par les Eqs. 6.8-6.9), il est difficile de déterminer leur niveau de contribution individuelle. Néanmoins, puisque chacun des termes est proportionnel aux forces normales, nous pouvons aisément conclure que la force totale suit également une tendance selon h^2 et $(H - y)^2$ tel que présenté plus haut.

7.3 Application à un mélangeur cylindrique

En guise d'illustration, nous étudions l'effet du pas de temps sur le mélange de particules dans un mélangeur cylindrique (diamètre interne de 30cm, longueur de 15 cm). Le système est rempli avec un mélange 50% bidisperse de particules de 1.5 et 3.0 mm de diamètre. Le mélangeur est rempli à moitié du volume utile (83820 particules). Tel que relevé précédemment, les profils de vitesse moyenne et de fluctuations (figure

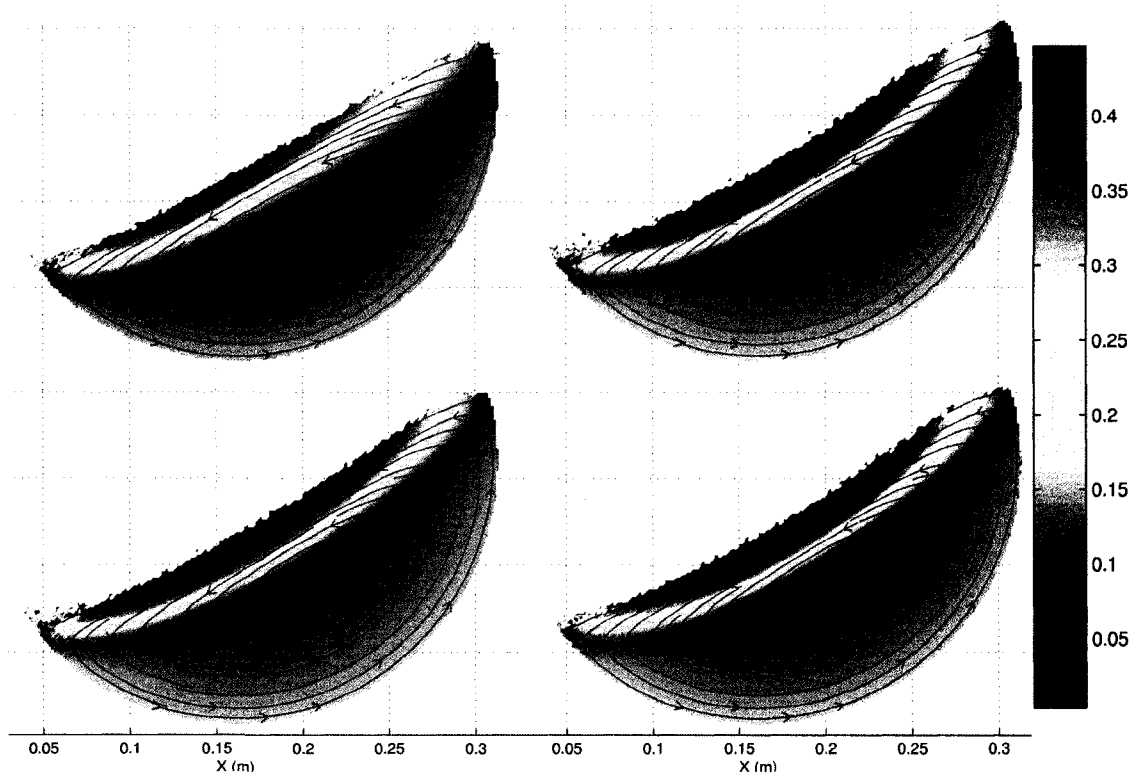


FIG. 7.3 – Effet du pas de temps h sur le champ de vitesse (d/s) : (a) $h = 5.0 \times 10^{-5}$ s, (b) $h = 1.0 \times 10^{-5}$ s, (c) $h = 2.0 \times 10^{-6}$ s, (d) $h = 1.0 \times 10^{-6}$ s .

7.3) présentent des instabilités caractéristiques (i.e. déplacement des lignes d'écoulement, modification des vitesses) pour des pas de temps élevés et semblent converger pour des valeurs faibles.

Au niveau macroscopique, les courbes de mélange montrent une transition claire sur la période d'autocorrélation[†] (en suivant la corrélation G_α avec $\alpha = \vec{i} \text{ et } \vec{j}$) de même que sur le taux de mélange. La figure 7.4 présente la fonction de corrélation le long des axes du repère. On peut donc voir clairement qu'une augmentation du pas de temps affecte le comportement macroscopique des particules, en particulier en altérant la

[†]Voir chapitre 4.

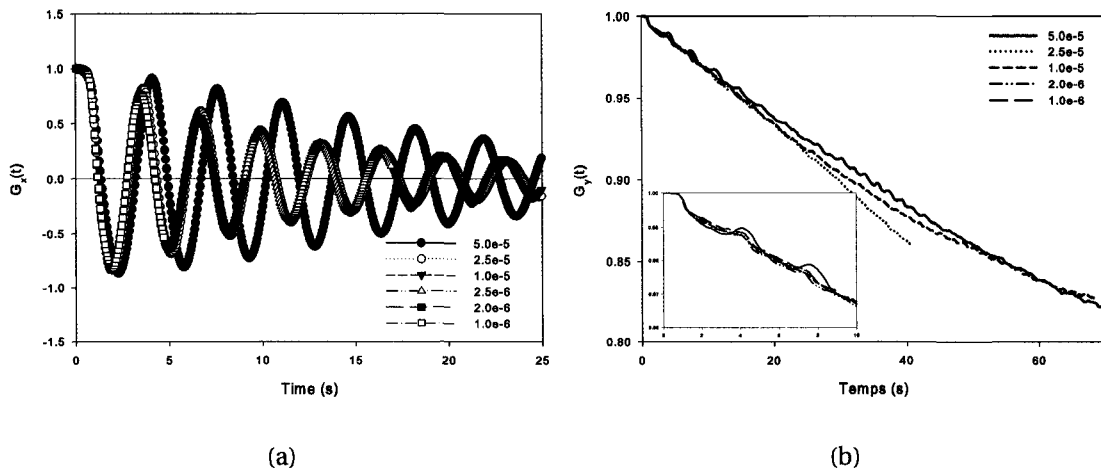


FIG. 7.4 – Effet du pas de temps h sur les propriétés de mélange : (a) Fonction de corrélation radiale, (b) Fonction de corrélation axiale.

période d'autocorrélation du système.

Dans la direction radiale, il est connu que le mélange est essentiellement lié à la périodicité des conditions frontières (Ottino, 1989; Ottino et Khakhar, 2000). Néanmoins, dans la direction axiale, l'absence de périodicité met en lumière le caractère diffusif du mélange. Ce phénomène est en soi plus complexe à prédire correctement à l'aide de la DEM puisqu'il provient des fluctuations particulières. Puisque nous avons montré que le pas de temps affecte l'historique de déformation des contacts et agit directement sur le profil de fluctuations, nous nous attendons à ce que, à partir de l'Eq. 7.7, le mélange diffusif soit plus difficile à décrire et soit plus sensible au pas de temps. Cette sensibilité est observée à la figure 7.4(b) où l'erreur sur la corrélation axiale persiste même pour $h = 2.5 \times 10^{-5}$ s, alors que dans la direction radiale (figure 7.4(a)), la corrélation semble avoir atteint une valeur constante.

7.4 Analyse dimensionnelle

Avant de conclure ce chapitre, nous proposons une analyse de l'équation de mouvement rattachée à chacune des particules afin d'y extraire les paramètres importants. Nous désirons déterminer le nombre de variables indépendantes dans l'équation et quel est l'impact de ces variables sur le terme d'erreur d'intégration. Il s'agit donc de raisonner sur l'équation adimensionnelle plutôt que sur la forme utilisée jusqu'à maintenant. Dans un premier cas, nous allons considérer le cas d'une collision normale simple entre une particule et une paroi.

7.4.1 Collision simple

Pour commencer, considérons une déformation unidimensionnelle d'une particule sphérique sur une surface plane. Posons δ comme étant la norme de cette déformation (normale) et x la position de la particule de telle sorte que $\delta = r - x$ pour $0 < x < r$. En nous basant sur les équations constitutives précédentes, la force totale subie par la particule au point de contact est donnée par :

$$m \frac{dv}{dt} = k_n \delta^\alpha + \gamma \delta^\beta \dot{\delta} - mg \quad (7.8)$$

où $\alpha, \beta > 0$, k_n est la constante d'élasticité, v est la vitesse de la particule, γ est le coefficient d'amortissement et $\dot{\delta}$ est la vitesse de déformation. Puisque la surface est immobile, la vitesse de déformation devient simplement $\dot{\delta} = v$. Définissons les variables adimensionnelles suivantes :

$$\check{x} = \frac{x}{r}, \check{\delta} = \frac{\delta}{r}, \check{v} = \frac{v}{v_0}, \check{t} = \frac{r}{v_0} t, \frac{d}{d\check{t}} = \frac{v_0}{r} \frac{d}{dt} \quad (7.9)$$

où r est le rayon de la particule (longueur caractéristique) et v_0 est la vitesse caractéristique du système. En réarrangeant les termes, Eq. 7.8 devient :

$$\frac{d\check{v}}{d\check{t}} - A\check{\delta}^\beta \check{v} - B\check{\delta}^\alpha + C = 0, \quad (7.10)$$

où A , B et C correspondent aux groupes adimensionnels suivants :

$$A = \frac{3}{4\pi} \frac{\gamma}{\rho v_0 r^{2-\beta}}, \quad (7.11)$$

$$B = \frac{3}{4\pi} \frac{k_n}{\rho v_0^2 r^{2-\alpha}}, \quad (7.12)$$

$$C = \frac{rg}{v_0^2}. \quad (7.13)$$

Dès maintenant, il est possible d'observer la présence du nombre de Froude (Fr) dans le groupe C . L'effet du nombre de Froude dans l'écoulement de matériaux granulaires a été le sujet de nombreuses études, particulièrement pour la mise à l'échelle de cylindres rotatifs (Ding et al., 2001). Nous allons maintenant développer les relations dans le cas de collisions multiples à plusieurs dimensions.

7.4.2 Cas à collisions multiples

L'argument pour généraliser l'analyse à des particules sphériques de même taille ayant plusieurs contacts provient de l'observation que la force totale exercée sur une particule est, en fait, le résultat de plusieurs forces agissant indépendamment à différents points de contact sur la particule. De façon plus générale, si la particule a N contacts sur sa surface, la force totale est donnée par :

$$\mathbf{F} = \sum_{i=1}^N \mathbf{f}_i, \quad (7.14)$$

où \mathbf{f}_i sont les forces à chacun des points de contact i . Nous avons montré à la section précédente que ces forces peuvent s'écrire en fonction des groupes adimensionnels.

La différence provient du fait que les déformations sur la particule en chaque point de contact ne sont pas nécessairement les mêmes. Nous ferons l'hypothèse que cette déformation est relativement similaire pour tous les contacts sur une même particule. Cette hypothèse est raisonnable pour plusieurs raisons, notamment dans le cas d'écoulements particuliers denses où les contacts sont dominants, et aussi parce que la particule est considérée comme étant en équilibre donc que les forces de cisaillement et les forces normales s'équilibrent à la surface de la particule.

Les déformations et taux de déformation du contact entre deux particules p et q sont donnés par $\delta_{pq} = \mathbf{x}_p - \mathbf{x}_q$ et $\dot{\delta}_{pq} = \mathbf{v}_p - \mathbf{v}_q$ respectivement. Notons par \mathbf{n}_{pq} le vecteur unitaire normal à la surface de la particule p au point de contact entre la particule p et q . Du point de vue de la particule p , la force de contact peut alors s'écrire :

$$m_p \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \left(k_n |\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_q|^\alpha + \gamma |\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_q|^\beta |\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_q| \right) \mathbf{n}_{pq} - m_p \mathbf{g} \quad (7.15)$$

En utilisant les mêmes variables adimensionnelles que précédemment, nous obtenons :

$$\frac{d\check{\mathbf{v}}_p}{dt} = \left(A |\check{\mathbf{x}}_p - \check{\mathbf{x}}_q|^\alpha + B |\check{\mathbf{x}}_p - \check{\mathbf{x}}_q|^\beta |\check{\mathbf{v}}_p - \check{\mathbf{v}}_q| \right) \mathbf{n}_{pq} - C \bar{\mathbf{g}}, \quad (7.16)$$

avec $\bar{\mathbf{g}}$ le vecteur unitaire dans la direction de la gravité. Puisque ceci est vrai pour p , ceci est aussi vrai pour q .

Maintenant que nous avons traité la collision entre deux particules, nous devons montrer que ceci tient aussi dans le cas de plusieurs contacts entre plusieurs particules ayant les mêmes propriétés. Posons U comme l'ensemble des particules q ayant un contact avec p . En combinant Eq. 7.14 et Eq. 7.16, nous obtenons

$$\frac{d\check{\mathbf{v}}_p}{dt} = \sum_{q \in U} \left(A |\check{\mathbf{x}}_p - \check{\mathbf{x}}_q|^\alpha + B |\check{\mathbf{x}}_p - \check{\mathbf{x}}_q|^\beta |\check{\mathbf{v}}_p - \check{\mathbf{v}}_q| \right) \mathbf{n}_{pq} - C \bar{\mathbf{g}}, \quad (7.17)$$

$$= A \left(\sum_{q \in U} |\check{\mathbf{x}}_p - \check{\mathbf{x}}_q|^\alpha \mathbf{n}_{pq} \right) + B \left(\sum_{q \in U} |\check{\mathbf{x}}_p - \check{\mathbf{x}}_q|^\beta |\check{\mathbf{v}}_p - \check{\mathbf{v}}_q| \mathbf{n}_{pq} \right) - C \bar{\mathbf{g}}. \quad (7.18)$$

Les groupes adimensionnels décrits plus haut sont clairement mis en évidence (dans l'hypothèse où les propriétés sont similaires pour toutes les particules $q \in U$).

7.4.3 Composante tangentielle : effet du coefficient de friction

Une question persiste à ce point en ce qui a trait à la composante tangentielle de la force. Nous n'avons qu'à démontrer que cette force est aussi une fonction des groupes adimensionnels présentés plus haut. Ceci relativement simple puisque le critère de Coulomb stipule que la composante tangentielle au point de contact entre la particule p et la particule q , notée \mathbf{f}_{pq}^t , est donnée par :

$$\mathbf{f}_{pq}^t = \mu |\mathbf{f}_{pq}| \mathbf{n}_{pq}^\perp \quad (7.19)$$

où \mathbf{n}_{pq}^\perp est le vecteur unitaire dans le plan normal à \mathbf{n}_{pq} . Puisque \mathbf{n}_{pq} est unitaire, la norme de \mathbf{f}_{pq} est donnée directement par Eq. 7.15 de sorte que :

$$\mathbf{f}_{pq}^t = \mu \left(k_n |\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_q|^\alpha + \gamma |\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_q|^\beta |\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_q| \right) \mathbf{n}_{pq}^\perp \quad (7.20)$$

Cette équation mène aux groupes adimensionnels présentés plus haut. Ainsi, l'équation de mouvement en forme adimensionnelle finale est donnée par :

$$\begin{aligned} \frac{d\check{\mathbf{v}}_p}{dt} &= A \sum_{q \in U} |\check{\mathbf{x}}_p - \check{\mathbf{x}}_q|^\alpha (\mathbf{n}_{pq} + \mu \mathbf{n}_{pq}^\perp) \\ &+ B \sum_{q \in U} |\check{\mathbf{x}}_p - \check{\mathbf{x}}_q|^\beta |\check{\mathbf{v}}_p - \check{\mathbf{v}}_q| (\mathbf{n}_{pq} + \mu \mathbf{n}_{pq}^\perp) - C \bar{\mathbf{g}}. \end{aligned} \quad (7.21)$$

Une remarque peut être formulée. L'analyse montre que les paramètres individuels du modèle n'ont pas de lien unique avec la solution de l'équation. En effet, les variables indépendantes du système sont les groupes A , B , C et μ .

7.5 Erreur numérique : cas simple

En ayant dérivé les équations adimensionnelles du mouvement, nous allons tirer profit de ces équations adimensionnelles pour en déterminer les bornes supérieures de l'erreur numérique en fonction des différents groupes adimensionnels.

7.5.1 Borne supérieure pour l'erreur

Supposons un cas purement élastique ($\gamma = 0$) et pour lequel une loi de contact linéaire est adoptée ($\alpha = 1$ et $\beta = 0$ dans l'Eq. 7.10). Étudions le mouvement d'une particule en chute libre lors d'une collision avec une surface plane. L'équation de mouvement prend alors la forme suivante :

$$x''(t) = -\frac{k_n}{m}x(t) - \frac{g}{m} \quad (7.22)$$

Posons $\omega = \sqrt{k_n/m}$. La trajectoire de la particule avec $x'(0) = 0$ et $x(0) = 0$ est donc donnée par :

$$x(t) = \frac{g}{k_n} (\cos \omega t - 1). \quad (7.23)$$

pour $0 < t < \pi/\omega$. Le terme d'erreur lié à l'utilisation d'une approximation de Taylor d'ordre 1 est

$$R_1(h) = \frac{h}{2!} x''(\xi), \quad (7.24)$$

pour $0 < \xi < t$. On connaît la valeur de x'' puisque la solution est connue et est donnée par :

$$x''(t) = -\frac{g}{m} (\cos \omega t - 1) - \frac{g}{m}. \quad (7.25)$$

On trouve alors une borne maximale pour le terme d'erreur

$$|R_1(h)| \leq C_1 \left| \frac{g}{m} \right| h. \quad (7.26)$$

pour $C_1 > 0$. Il est clair que ce terme ne dépend pas de k_n . Maintenant supposons que la particule a aussi une vitesse initiale $x'(0) = v_0$. Nous avons alors :

$$x(t) = \frac{v_0}{\omega} \sin \omega t + \frac{g}{k} (\cos \omega t - 1). \quad (7.27)$$

Le terme d'erreur prend alors la forme suivante :

$$|R_1(h)| \leq C_2 \left| \omega v_0 + \frac{g}{m} \right| h, \quad (7.28)$$

$$\leq C_2 \left| \sqrt{\frac{k_n}{m}} v_0 + \frac{g}{m} \right| h \quad (7.29)$$

avec $C_2 > 0$. En supposant maintenant que la méthode est d'ordre 2, nous pouvons développer le terme suivant :

$$|R_2(h)| \leq C_3 \left| \frac{k_n}{m} v_0 + \frac{g}{m} \sqrt{\frac{k_n}{m}} \right| h^2. \quad (7.30)$$

Afin de relier le terme d'erreur aux paramètres véritablement indépendants (i.e. les groupes adimensionnels développés plus haut), nous allons utiliser l'équation adimensionnelle. Celle-ci s'écrit :

$$\ddot{x}(\check{t}) = -B\check{x} - C \quad (7.31)$$

pour laquelle la solution analytique avec $\check{x}'(0) = 1$ et $\check{x}(0) = 0$ est donnée par :

$$\check{x}(\check{t}) = \frac{1}{\sqrt{B}} \sin \sqrt{B}\check{t} + \frac{C}{B} (\cos \sqrt{B}\check{t} - 1). \quad (7.32)$$

Les bornes d'erreurs peuvent alors être obtenues de la même manière et on trouve :

$$|\check{R}_1(h)| \leq C_4 \left| \sqrt{B} + C \right| h \quad (7.33)$$

$$|\check{R}_2(h)| \leq C_5 \left| B + C\sqrt{B} \right| h^2 \quad (7.34)$$

pour $C_4, C_5 > 0$.

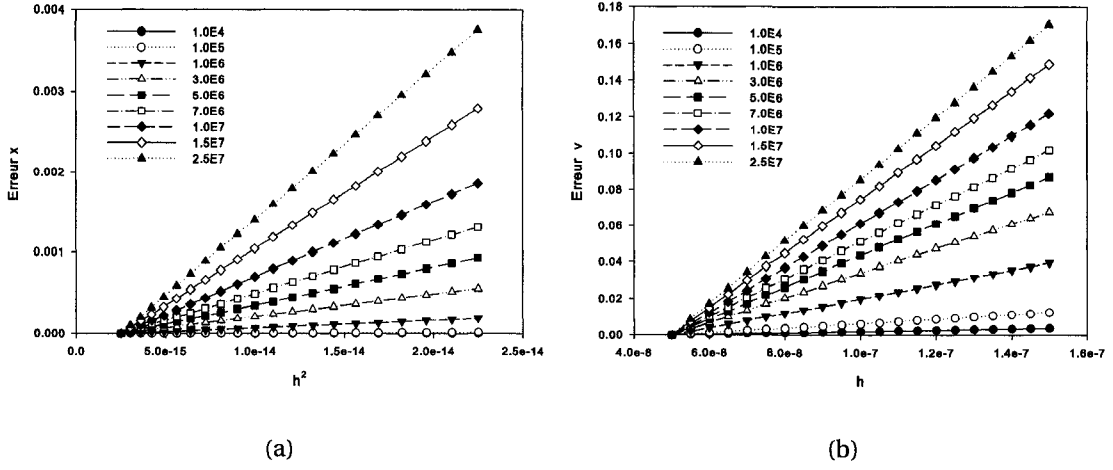


FIG. 7.5 – (a) Évolution ϵ_x en fonction de h^2 . (b) Évolution de ϵ_v en fonction de h . En légende, valeurs de k_n utilisées.

7.5.2 Résultats

Nous avons simulé le contact d'une particule sur une surface plane avec une vitesse initiale v_0 et sans gravité ($C = 0$). La méthode d'intégration utilisée est le schéma HSLV de O'Sullivan et Bray (2004). Nous avons étudié l'effet du pas de temps sur la solution obtenue et calculé l'erreur entre la solution obtenue avec le pas de temps le plus faible et les autres solutions. Cette erreur est calculée par :

$$\epsilon_x = \frac{\int_0^{t_c} |x_h(t) - x_1(t)| dt}{\int_0^{t_c} |x_1(t)| dt}, \epsilon_v = \frac{\int_0^{t_c} |v_h(t) - v_1(t)| dt}{\int_0^{t_c} |v_1(t)| dt} \quad (7.35)$$

où $x_h(t)$ et $v_h(t)$ correspondent à la solution avec le pas de temps h et $x_1(t)$ et $v_1(t)$, la solution obtenue avec le plus petit pas de temps. Afin de vérifier la validité des Eqs. 7.29-7.30, nous avons calculé le terme d'erreur en fonction de h avec différentes valeurs de k_n .

La figure 7.5 présente l'évolution du terme d'erreur ϵ_x et ϵ_v en fonction du pas de temps employé et pour différentes valeurs de k_n . On remarque que $\epsilon_x = O(h^2)$ et

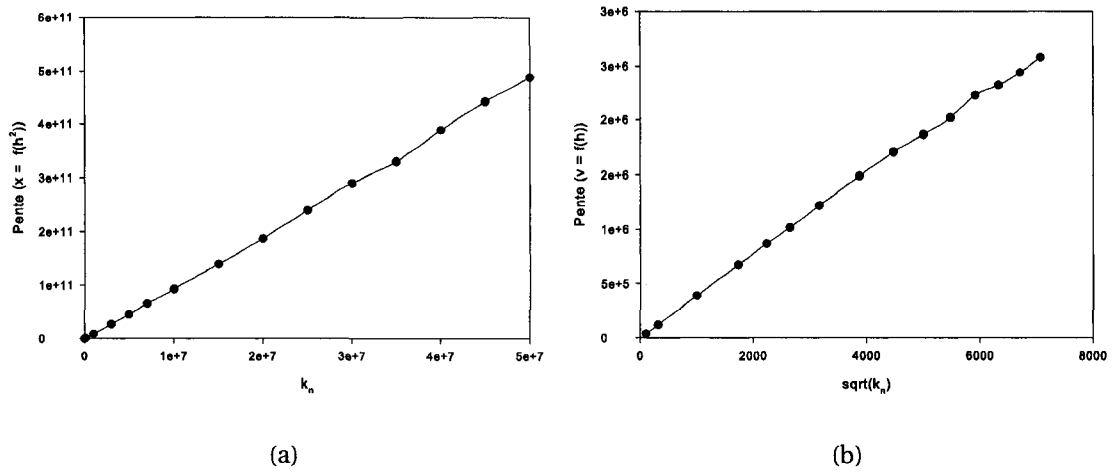


FIG. 7.6 – (a) Pente de l'erreur de ϵ_x en fonction de k_n . (b) Pente de ϵ_v en fonction de $\sqrt{k_n}$.

$\epsilon_v = O(h)$ conformément à Eq. 7.30.

Si on se fie à ces expressions, la pente est fonction de k_n . Nous pouvons également vérifier l'ordre de la pente par rapport à ce paramètre. À cet effet, la figure 7.6 présente les pentes des droites obtenues à la figure 7.5 en fonction de k_n (en posant $C = 0$). On observe, tel que prévu par les Eqs. 7.29 et 7.30 que la pente de l'erreur sur la position $x(t)$ varie selon k_n et la pente de l'erreur sur la vitesse varie en fonction de $\sqrt{k_n}$.

7.5.3 HSLV vs Euler

Pour terminer ce chapitre, nous proposons de vérifier l'effet du schéma d'intégration sur les résultats obtenus. Pour ce faire, nous proposons d'utiliser la méthode de Euler qui est une méthode d'ordre 1.

$$\mathbf{x}(t+h) = \mathbf{x}(t) + \mathbf{v}(t)h, \quad (7.36)$$

$$\mathbf{v}(t+h) = \mathbf{v}(t) + \mathbf{a}(t)h. \quad (7.37)$$

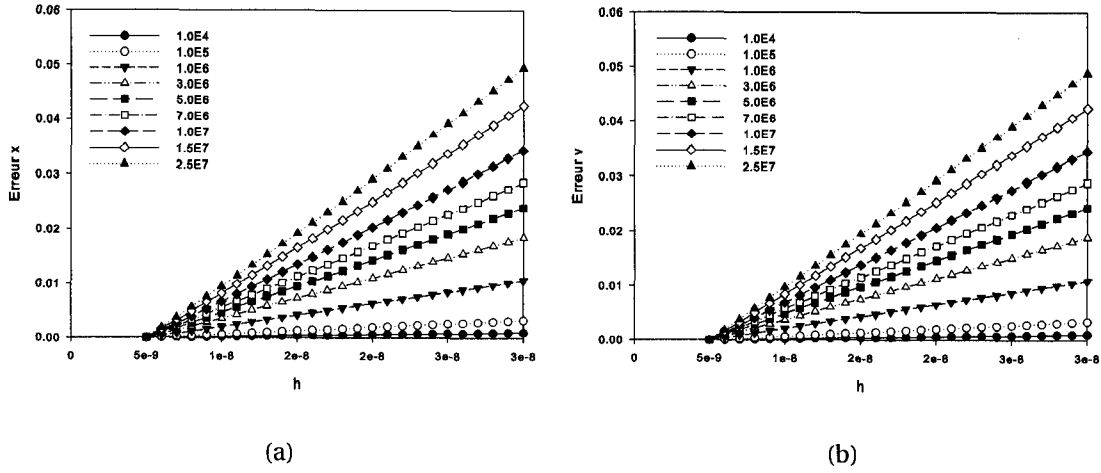


FIG. 7.7 – (a) Évolution ϵ_x en fonction de h . (b) Évolution de ϵ_v en fonction de h . En légende, valeurs de k_n utilisées.

On observe la tendance anticipée, i.e. les termes d'erreur ϵ_x et ϵ_v varient linéairement selon h . Ces résultats pour différentes valeurs de k_n sont présentés à la figure 7.7. La pente varie, dans les deux cas, linéairement selon $\sqrt{k_n}$, tel qu'anticipé. On remarque aussi qu'avec cette méthode, pour un pas de temps identique, l'erreur est systématiquement plus élevée d'au moins 2 ordres de grandeur. Il convient donc d'utiliser la méthode HSLV pour gagner un ordre sur le terme d'erreur de la position $x(t)$ et aussi pour réduire, en valeur absolue, la norme de cette erreur. Ceci est en accord avec les résultats présentés dans Fraige et Langston (2004).

7.6 Conclusion du chapitre

Ce chapitre a présenté la première étude visant à déterminer la précision des simulations d'écoulement et de mélange de particules utilisant la méthode des éléments discrets. L'effet du pas de temps sur l'erreur de troncature a été présenté. En particu-

lier, l'existence d'une solution stable n'est pas une condition nécessaire pour qu'elle soit exacte. Nous avons montré que la dynamique locale de la déformation est affectée par le pas de temps et que cette erreur se répercute aussi au niveau macroscopique, tant au niveau des champs de vitesses et de fluctuations moyennes que sur les quantités dynamiques telles que les temps d'autocorrélation et de mélange. Un résultat important montre que cette erreur est contrôlée et que la solution est consistante : la solution converge pour des pas de temps de plus en plus petits.

Une analyse dimensionnelle de l'équation de mouvement nous a permis de mettre en évidence certaines caractéristiques de ce système d'équations. Les variables indépendantes de ce système sont le coefficient de frottement μ , et les groupes adimensionnels suivants :

$$A = \frac{\gamma}{\rho v_0 r^{2-\beta}}, B = \frac{k_n}{\rho v_0^2 r^{2-\alpha}}, C = \frac{r g}{v_0^2}.$$

Nous avons pu également, à l'aide de cette forme adimensionnelle, déterminer la véritable relation entre les groupes adimensionnels et la borne supérieure de l'erreur numérique liée à la troncature. Pour le schéma d'intégration basés sur le HSLV de O'Sullivan et Bray (2004), ces bornes respectives prennent la forme suivante :

$$|\check{R}_1(h)| \leq C_4 \left| \sqrt{B} + C \right| h \quad (7.38)$$

$$|\check{R}_2(h)| \leq C_5 \left| B + C\sqrt{B} \right| h^2 \quad (7.39)$$

Ces bornes sont en accord avec les résultats obtenus et démontrent la consistance de la solution par rapport au pas de temps.

Chapitre 8

Modélisation du mélange granulaire par chaînes de Markov

8.1 Contexte

[†]Les méthodes actuelles de simulation de mélange de matériaux granulaires sont basées sur des méthodes d'éléments discrets, reconnues pour être particulièrement prohibitives en termes de ressources de calcul nécessaires pour simuler des cas même simples. Ces modèles ont subi d'importants développements puisque de récents travaux expérimentaux commencent à montrer leur capacité à prédire plusieurs propriétés macroscopiques telles que la mesure de la dynamique de mélange, le moment angulaire qui agit sur la géométrie de même que les champs moyens de vitesse (Kuo et al., 2002; Sudah et al., 2005; Lemieux et al., 2006). Néanmoins, les ressources de

[†]Ce chapitre a été publié en entier dans J. Doucet, N. Hudon, F. Bertrand and J. Chaouki, *Modeling of the mixing of monodisperse particles using a stationary DEM-based Markov process*, Computers and Chemical Engineering, In press. (doi :10.1016/j.compchemeng.2007.06.017)

calcul nécessaires pour la simulation de systèmes particuliers de taille industrielle rendent cette approche moins attrayante et motivent le développement d'approches de modélisation hybrides ou complémentaires.

Une telle approche de modélisation est basée sur l'utilisation d'un processus markovien, laquelle a rarement été utilisée pour l'analyse et la modélisation du mélange granulaire. En effet, une introduction hâtive de ces modèles par Chen et Fan (1972) pour la simulation de l'écoulement dans des mélangeurs statiques a démontré que des résultats très satisfaisants pouvaient être obtenus et que le temps de mélange pouvait être facilement prédit par ce modèle. Plus récemment, un modèle similaire a été appliqué sur un mélangeur à bascule dont le mélange axial et radial a pu être dissocié et simulé indépendamment (Aoun-Habbache et al., 2002). Toutefois, en raison de la difficulté liée à la construction d'une matrice de transition robuste, résultat des limitations expérimentales, plusieurs hypothèses simplificatrices ont dû être faites en imposant, par exemple, la distance au-delà de laquelle des états deviennent inaccessibles, ou encore en construisant les probabilités de transitions sur la foi de deux degrés de liberté. Malgré ces hypothèses, des résultats impressionnants ont permis de conclure qu'une chaîne de Markov constitue une avenue intéressante pour la modélisation du mélange granulaire (Berthiaux et al., 2005).

L'objectif de ce chapitre est d'introduire une nouvelle stratégie de modélisation et d'analyse dans le contexte du mélange de particules monodisperses. La méthode proposée est basée sur l'hypothèse que l'écoulement et le mélange de particules monodisperses peuvent être modélisés par une chaîne de Markov stationnaire, i.e. par une matrice de transition (opérateur linéaire) indépendante du temps. L'opérateur est construit directement en mesurant les transitions entre différents états accessibles d'un espace d'état fini S en utilisant les résultats obtenus par quelques itérations de

la DEM. Une hypothèse similaire a été posée dans les travaux de Chen et Fan (1972), Aoun-Habbache et al. (2002) et Chou et al. (1977). Notons que quelques travaux ont utilisé les chaînes de Markov non stationnaires pour décrire l'écoulement de particules monodisperses ou polydisperses (Chou et al., 1977; Rippie et Chou, 1978). Nous pouvons également mentionner au passage que la majorité des simulations d'écoulements particulières impliquant la DEM ont touché des systèmes monodisperses (Bertrand et al., 2005). Malgré cet état de fait, les nombreux travaux reliés à ces résultats ont permis, bien qu'étant limités à une petite classe de systèmes particulières, de mieux comprendre certains mécanismes de mélange dans différentes géométries et conformations. L'approche proposée a l'avantage d'être peu intensive en terme de calculs et implique des outils d'analyse issus de la théorie des opérateurs markoviens (c.f. chapitre 9).

Le chapitre est divisé de la manière suivante. D'abord, une brève définition d'un processus markovien est présentée. Puis la procédure pour la construction de la chaîne de Markov en utilisant un champ vectoriel correspondant à la position d'une population de particules obtenue par DEM est ensuite décrite en détail. Par la suite, l'approche proposée est appliquée sur un mélangeur cylindrique contenant des particules sphériques de même diamètre. Finalement, l'effet de certains paramètres de la méthode sur la solution obtenue est ensuite investigué, en particulier l'effet du pas de temps du processus, du nombre d'états dans l'espace d'état, de même que le temps d'apprentissage, ce dernier étant le temps de simulation DEM requis pour la construction de la matrice de transition. Ce chapitre montre, en particulier, que dans certaines conditions, la dynamique de mélange d'un système comportant un grand nombre de degrés de liberté peut être prédite avec une bonne précision par une transformation linéaire prenant la forme d'un processus de Markov.

8.2 Définition d'un processus de Markov

Soit un espace de probabilité \mathbb{P} , un espace d'états fini $S = \{1, 2, \dots, N\}$ à N dimensions, un processus stochastique $\{X_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ et une mesure invariante de probabilité \mathcal{P} . Le processus stochastique est dit markovien si

$$\mathcal{P}\{X_{n+1} | X_n, X_{n-1}, \dots, X_0\} = \mathcal{P}\{X_n\}. \quad (8.1)$$

En d'autres termes, une évolution markovienne X_{n+1} dépend uniquement de l'état actuel du système à l'itération n , soit X_n (Chung, 1967). Par construction, la probabilité $\mathcal{P}\{X_0 = j\} = 1$ pour un $j \in S$ lorsque X démarre dans l'état j . Plus généralement, la probabilité de transition à partir de l'état j vers l'état i après n itération, soit $p^n(i|j)$, est définie par

$$p^n(i|j) = \mathcal{P}\{X_n = i | X_0 = j\}, \quad (8.2)$$

pour tout $i, j \in S$. Dans ce chapitre, nous posons que le processus est stationnaire, i.e. que les probabilités de transitions sont indépendantes de n , de sorte que $p^n(i|j) = p(i|j)$. Considérons maintenant un vecteur d'état de dimension N après l itérations, $\mu_l = [\mu_l(1), \mu_l(2), \dots, \mu_l(N)]$ de sorte que chacun des éléments s'écrit

$$\mu_l(i) = \mathcal{P}\{X_l = i\}, \quad \forall i \in S, 0 \leq l \leq (n+1). \quad (8.3)$$

La propriété des chaînes de Markov nous permet d'écrire ensuite que

$$\mu_{n+1}(i_{n+1}) = \mu_0(i_0) \prod_{k=1}^n p(i_k | i_{k-1}), \quad (8.4)$$

où $\{i_0, i_1, \dots, i_n, i_{n+1}\} \in S^{n+2}$ représente une séquence d'événements jusqu'à l'itération $n+1$. Par définition, la matrice de transition \mathbf{P} , définie par $P_{ij} = p(j|i)$, possède les propriétés suivantes :

$$P_{ij} \geq 0, \quad \sum_{i \in S} P_{ij} = 1, \quad \forall j \in S. \quad (8.5)$$

En utilisant la matrice de transition, on peut réécrire le problème Eq.8.4 sous la forme matricielle

$$\mu_n = \mu_0 \mathbf{P}^n. \quad (8.6)$$

8.2.1 Construction du processus de Markov

D'après l'Eq. 8.6, la construction du processus de Markov implique la détermination des valeurs contenues dans la matrice de transition \mathbf{P} . Dans ce travail, nous proposons d'utiliser quelques itérations de simulations DEM pour prédire la position d'une particule dans le domaine et définir cette matrice de transition. Le modèle de DEM utilisé dans ce travail est une variante du modèle ressort-amortisseur de Cundall et Strack (1979) et est décrit en détail dans Lemieux et al. (2006). L'utilisation de résultats de DEM est en aucun cas restrictif. Les entrées de la matrice peuvent également être déterminées expérimentalement, par échantillonnage (e.g. dans Chen et Fan (1972); Berthiaux et al. (2005)) ou encore par des méthodes non-intrusives.

Considérons une décomposition du domaine Ω en N tétraèdres formant ainsi les N états de S . Un exemple typique de maillage est présenté à la figure 8.1. Après chaque période τ dans la simulation DEM, chaque particule originalement dans un état i est suivie afin de déterminer le nouvel état qui la contient. Afin d'y parvenir, le nombre total de particules dans l'état $i \in S$ au temps t est d'abord calculé par

$$\varphi(i, t) = \sum_{p=1}^{N_p} \phi_p(i, t), \quad (8.7)$$

où N_p est le nombre total de particules dans Ω et $\phi_p(i, t)$ est une fonction indicatrice qui retourne 1 si la particule p est dans l'état i au temps t et 0 sinon. La probabilité de

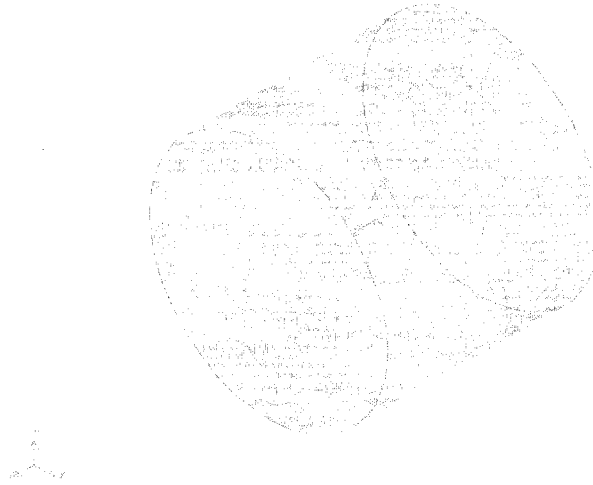


FIG. 8.1 – Décomposition type pour l'espace d'état S .

transition de l'état i vers l'état j , \mathbf{P}_{ij} , est alors obtenue par

$$\mathbf{P}_{ij} = \frac{1}{N_{LT}} \sum_{n=1}^{N_{LT}} \frac{1}{\varphi(i, t_n)} \sum_{p=1}^{N_p} \phi_p(j, t_n) \phi_p(i, t_{n-1}), \quad (8.8)$$

avec $t_n = n\tau$ et $T = N_{LT}\tau$. Dans ces expressions, T représente le *temps d'apprentissage* pour la construction de la matrice de transition, i.e. le temps durant lequel la simulation DEM a été observée pour évaluer les probabilités de transitions, et N_{LT} est le nombre d'intervalles de temps τ requis pour le processus d'apprentissage. La matrice de transition est construite lorsque les conditions d'écoulement en régime permanent sont atteintes.

Dans le reste de ce chapitre, la précision de la méthode hybride DEM-processus de Markov (DEM-MPM) sera déterminée au moyen du cylindre rotatif, tel qu'utilisé dans les chapitres précédents. En particulier, l'effet du pas de temps τ , du nombre d'états N et du temps d'apprentissage T seront investigués.

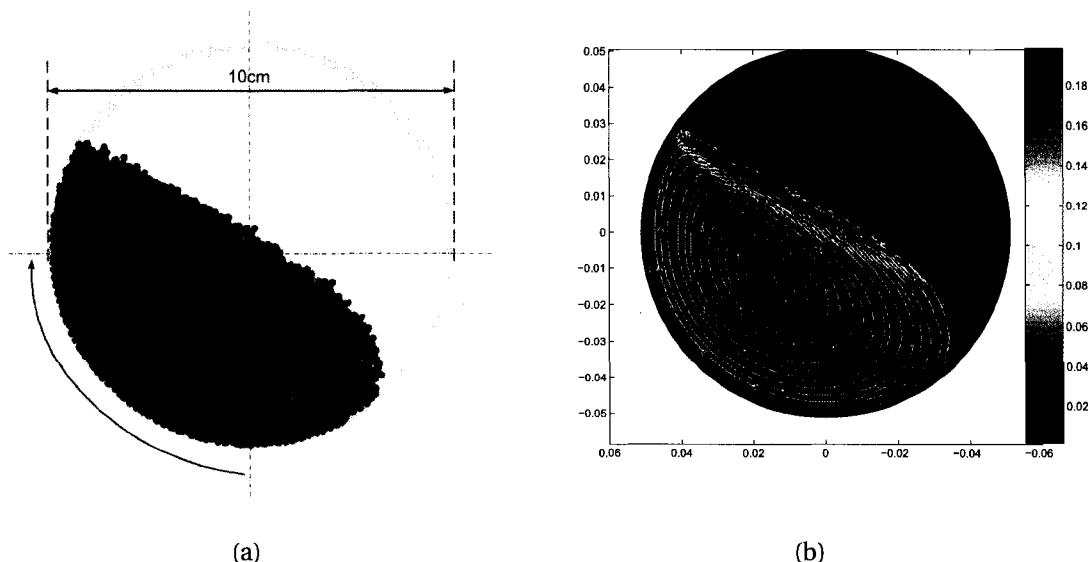


FIG. 8.2 – (a) Distribution initiale de particules dans le système de mélange. (b) Champs de vitesses moyennes et lignes de courant en régime permanent (la légende présente la norme de la vitesse moyenne dans le plan radial (m/s)).

8.2.2 Application au mélange granulaire

Considérons un système de mélange contenant, pour les besoins de la cause, des particules bleues et rouges ayant toutes les autres propriétés identiques (tailles, sphéricité, dureté, etc.). Supposons une fonction indicatrice de couleurs $C(p)$, $p = 1, \dots, N_p$, qui permet d'identifier la couleur de la particule p . Dans ce cas, sans perte de généralité, cette fonction prend les valeurs 1 ou 0 correspondant aux couleurs bleu et rouge, respectivement. Soit une distribution initiale de couleur dont un exemple est présenté à la figure 8.2(a). Nous proposons de calculer la position successive des particules dans le mélangeur en fonction du temps en utilisant le processus de Markov présenté à la section précédente.

Pour fins de comparaison, la solution obtenue à l'aide de la DEM est calquée sur l'espace S et la fraction de matériel coloré est calculé dans chaque état. L'écart-type

relatif (RSD) de la fraction de couleur distribuée sur l'espace S est ainsi pris comme une mesure de l'évolution du mélange dans le système. Cet indice est obtenu en calculant d'abord la variance σ^2 de la fraction de particules d'un type de couleur (e.g. rouge) dans chaque état de S :

$$\sigma^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{j \in S} (x_j - \bar{x})^2, \quad (8.9)$$

où x_j est la fraction de particules rouges dans l'état j et \bar{x} est la fraction totale de particules rouges dans Ω . La RSD est alors donnée par :

$$RSD = \frac{\sigma}{\bar{x}}. \quad (8.10)$$

Il est bien connu que la borne inférieure de la RSD est la valeur de l'écart-type relatif d'un mélange aléatoire :

$$RSD_r = \frac{1}{\bar{x}} \sqrt{\frac{\bar{x}(1-\bar{x})}{m}}, \quad (8.11)$$

où m est le nombre de particules dans chaque état (tel que discuté au chapitre 4). Dans le cas étudié dans ce travail (voir section 8.3), m n'est pas nécessairement constant dans tous les états, de sorte que l'Eq. 8.11 ne peut pas être utilisée pour évaluer RSD_r . Comme alternative, cette valeur a été approximée en calculant numériquement la valeur de la RSD de 100 mélanges aléatoires dans S en utilisant l'Eq. 8.9 et l'Eq. 8.10, qui donnent une valeur de RSD_r de 0.37 ± 0.02 . Pour éviter de faire face à des valeurs non entières de particules dans les états en itérant directement le processus de Markov, ce qui rendrait impossible la comparaison des courbes de RSD obtenues par la DEM et le processus de Markov, une méthode de Monte-Carlo a été utilisée afin de déplacer chaque particule d'un état à l'autre au moyen de la matrice de transition \mathbf{P} . Plus précisément, l'état contenant la particule p à l'itération $n + 1$, en considérant que la

particule est dans l'état i à l'itération n , correspond au plus petit $j \in S$ tel que :

$$\chi(p) \leq \sum_{k=1}^j \mathbf{P}_{ik}, \quad (8.12)$$

où $\chi(p)$ est un nombre aléatoire uniforme entre 0 et 1. Afin d'étudier l'évolution du mélange au-delà du temps d'apprentissage T , l'opérateur peut être appliqué successivement pour un nombre d'itérations N_{tf} , qui correspond à un temps de simulation de $T_f = N_{tf}\tau$.

8.3 Résultats et discussion

La méthode proposée est appliquée à un système de mélange comprenant 48 000 particules de 2 mm de diamètre dans un tambour rotatif de 10 cm de diamètre et d'une longueur de 9 cm avec une rotation de 10 RPM. Ces caractéristiques mènent à un nombre de Froude ($Fr = \omega^2 r / g$, avec ω et r la vitesse angulaire et le rayon du cylindre rotatif respectivement) dans l'ordre de 10^{-2} ce qui est caractéristique des écoulements en mode de roulement[†] (Mellmann, 2001). Le domaine de calcul est divisé en N cellules correspondant à chaque état du système. N varie de 72 à 5595, et une discussion sur ce paramètre suivra.

Les calculs impliquant la DEM ont été effectués sur une grappe utilisant 8 processeurs Intel Xeon 3.6 GHz. Les calculs impliquant la DEM-MPM ont été effectués en série. Les paramètres importants relatifs au problème décrit sont présentés au tableau 8.1. La simulation impliquant la DEM-MPM requiert entre 1 à 10 minutes de temps CPU pour effectuer 8 révolutions du cylindre, la variabilité étant due au nombre d'état considéré dans le problème. Les particules sont originellement au repos dans le

[†]Rolling regime

domaine et la matrice de transition est calculée après l'atteinte d'un régime pseudo-permanent (i.e. stabilité du champ de vitesse). Les autres paramètres de la simulation DEM, leur connaissance n'étant pas essentielle dans le contexte de ce chapitre, sont similaires à ceux utilisés aux chapitres 6 et 7. La DEM-MPM retourne le nombre de particules rouges et bleues dans chaque état du système à chaque itération, mais ne donne aucune information quant à la position exacte de la particule à l'intérieur de l'état. Afin de permettre une visualisation de la distribution de la couleur des particules dans Ω , les particules bleues et rouges sont distribuées de façon aléatoire conformément à la fraction calculée à l'intérieur de chaque état, ce qui implique que les particules sont considérées comme parfaitement mélangées à l'intérieur d'un état (cellule). Ceci découle directement de l'hypothèse de Markov établie au départ.

L'effet du pas de temps, du nombre d'états (ou cellules) et du temps d'apprentissage sur la précision de la solution obtenue par la DEM-MPM est le sujet d'étude des sections suivantes. Cette comparaison est effectuée en observant les patrons de ségrégation et les courbes de RSD obtenues avec la DEM-MPM et celles obtenues avec la DEM (assimilée à la solution de référence).

8.3.1 Effet du pas de temps du processus de Markov

La figure 8.3 présente les courbes de RSD obtenues en utilisant la DEM et la DEM-MPM avec $N = 1813$, $N_{LT} = 2$ et différentes valeurs de τ . Tel qu'observé, il existe une valeur de τ au-delà de laquelle les courbes de RSD obtenues avec la DEM-MPM deviennent proches de celles obtenues par la DEM. En effet, ce seuil correspond au temps caractéristique du système (c.f. chapitre 4). Dans le cas qui nous intéresse, cette valeur est de 4.05 secondes, laquelle est inférieure au temps requis pour compléter une rotation (6.00 secs. à 10 rpm). Ceci peut être vu comme la période durant laquelle le

TAB. 8.1 – Paramètres utilisés pour la méthode DEM-MPM

Paramètre	Valeur	Unités
Nombre de particules	48 000	–
Diamètre de particules	2.0	mm
Vitesse de rotation	10	RPM
Pas de temps (DEM)	1.5×10^{-5}	s
τ	1/12, 1, 2, 3, 4	s
N_{LT}	1-12	itérations
N (taille du maillage)	72 (3.0), 253 (2.0), 1813 (1.0), 3587 (0.75), 5595 (0.60)	cellules (cm)

système subit la même opération de manière successive, à la manière d'une transformation linéaire (matrice de transition) appliquée sur un vecteur (vecteur d'état), tel qu'illustré à l'Eq. 8.6.

Deux courbes de RSD obtenues avec $\tau = 4s$ sont présentées à la figure 8.3(b). La courbe avec cercles blancs correspond à la situation où la période d'apprentissage démarre au début de la simulation de DEM, alors que pour la courbe avec triangles, la phase d'apprentissage démarre à la moitié du temps caractéristique (i.e. 2 sec.). Les résultats obtenus montrent que, malgré le fait que le processus de Markov ne peut fournir la position de la particule à l'intérieur de l'intervalle de temps $]m\tau, (m+1)\tau[$ pour $m \in \mathbb{N}$ puisque la chaîne est discrète, son application avec une seule matrice de transition et deux situations initiales distinctes dans le même intervalle $]0, \tau[$ mènent à des résultats qui se retrouvent dans l'enveloppe des la courbe de RSD obtenue avec la DEM.

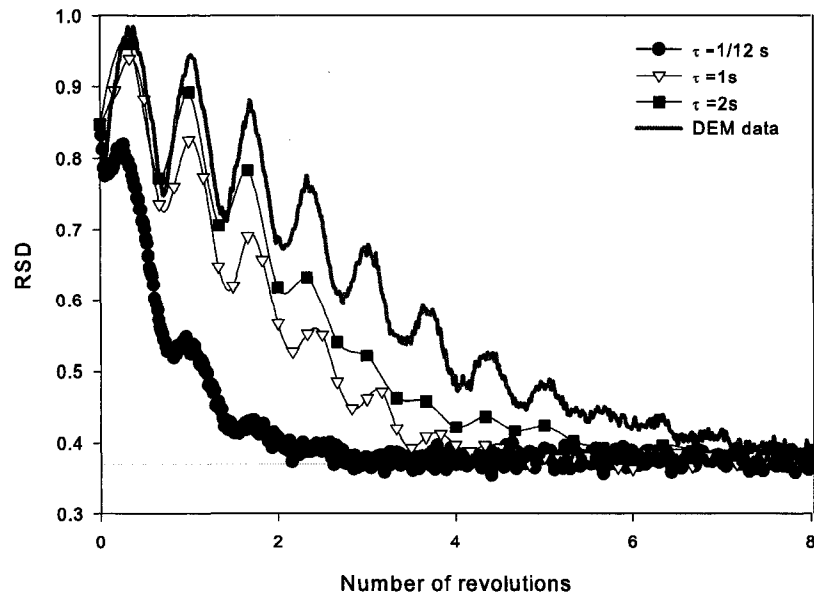
On observe à la figure 8.4 qu'il existe une bonne correspondance qualitative entre

les résultats obtenus avec DEM-MPM et DEM seul, la prédiction des patrons de mélange étant néanmoins affectée par la valeur du pas de temps τ utilisée pour la chaîne de Markov. La diffusion numérique inhérente à la DEM-MPM provient du fait que les particules sont toujours remélangées à l'intérieur d'une cellule à chaque itération du processus. Ceci provient, tel que discuté plus haut, de la nature sans mémoire du processus de Markov, i.e. que la position exacte de la particule à l'intérieur de l'état est inconnue à tout moment.

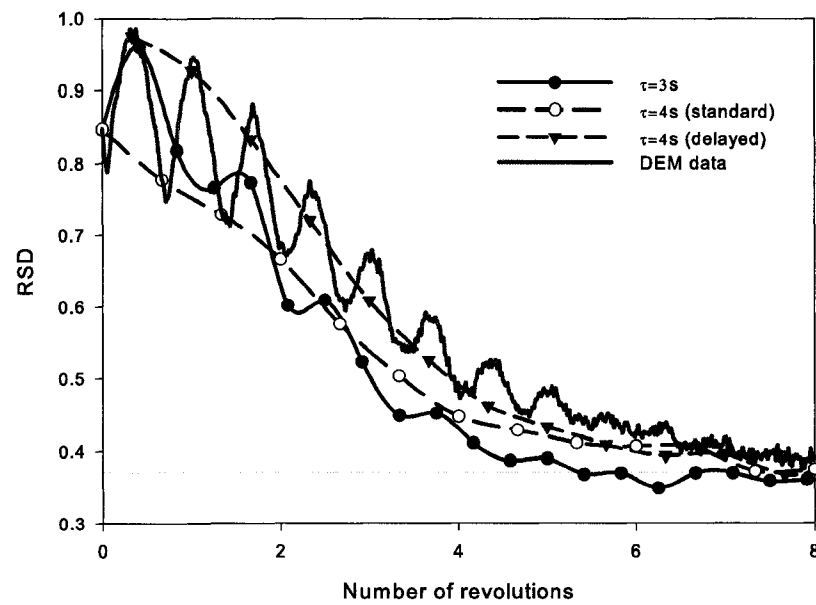
8.3.2 Effet du nombre d'états

L'effet du nombre d'états ou cellules sur le niveau de diffusion numérique est déterminé en considérant 5 différentes décompositions du domaine avec des tailles de maille décroissantes, tel que présentées au tableau 8.1. Pour ces simulations, les paramètres suivants ont été utilisés $\tau = 4s$ et $N_{LT} = 2$.

La figure 8.5 présente la distribution de la fonction indicatrice de couleur sur une section transversale du mélangeur cylindrique après $t = 2, 6, 10$ et $14s$. Les résultats de DEM sont présentés à la figure 8.5(q)-8.5(t). Les résultats issus de la méthode DEM-MPM sont présentés aux figures 8.5(a)-8.5(d), 8.5(e)-8.5(h), 8.5(i)-8.5(l), 8.5(m)-8.5(p) pour $N = 253, 1813, 3587$ et 5595 cellules, respectivement. Notons que les distributions de couleur obtenues avec différentes tailles de cellules ont été projetées sur un maillage de références (taille de maille de 1.0 cm) afin de conserver la même valeur asymptotique de RSD, soit la $RSD_r = 0.37$, tel que discuté à la section 8.2.2. Ces figures révèlent que les patrons d'écoulement prédits par la DEM-MPM convergent vers les patrons obtenus avec la DEM pour des valeurs décroissantes de tailles de maille (augmentation de la dimension de l'espace d'état). Une conclusion similaire peut être tirée de la figure 8.6 qui présente les courbes de RSD pour différentes valeurs de N .



(a)



(b)

FIG. 8.3 – Comparaison des courbes de RSD obtenues avec la DEM et celles obtenues avec DEM-MPM avec $N=1813$, $N_{LT} = 2$ et différentes valeurs de τ .

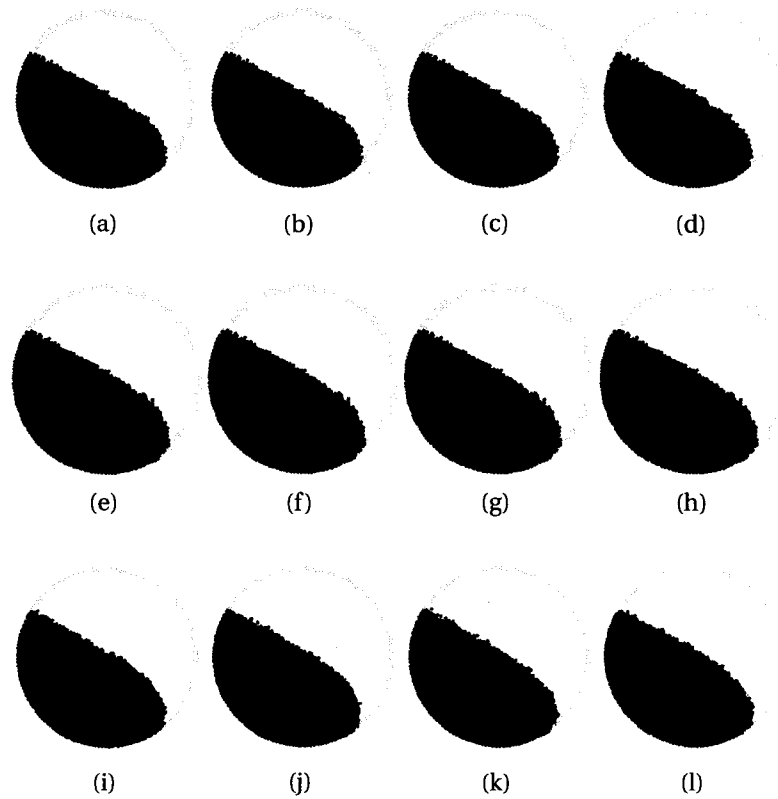


FIG. 8.4 – Distribution de particules dans une section centrale du cylindre après $t = 2, 6, 10, 14$ s, respectivement, pour $N = 1813$ et $N_{LT} = 2$. Figures 8.4(a)-8.4(d), $\tau = 2$ s; figures 8.4(e)-8.4(h), $\tau = 4$ s; figures 8.4(i)-8.4(l), résultats DEM.

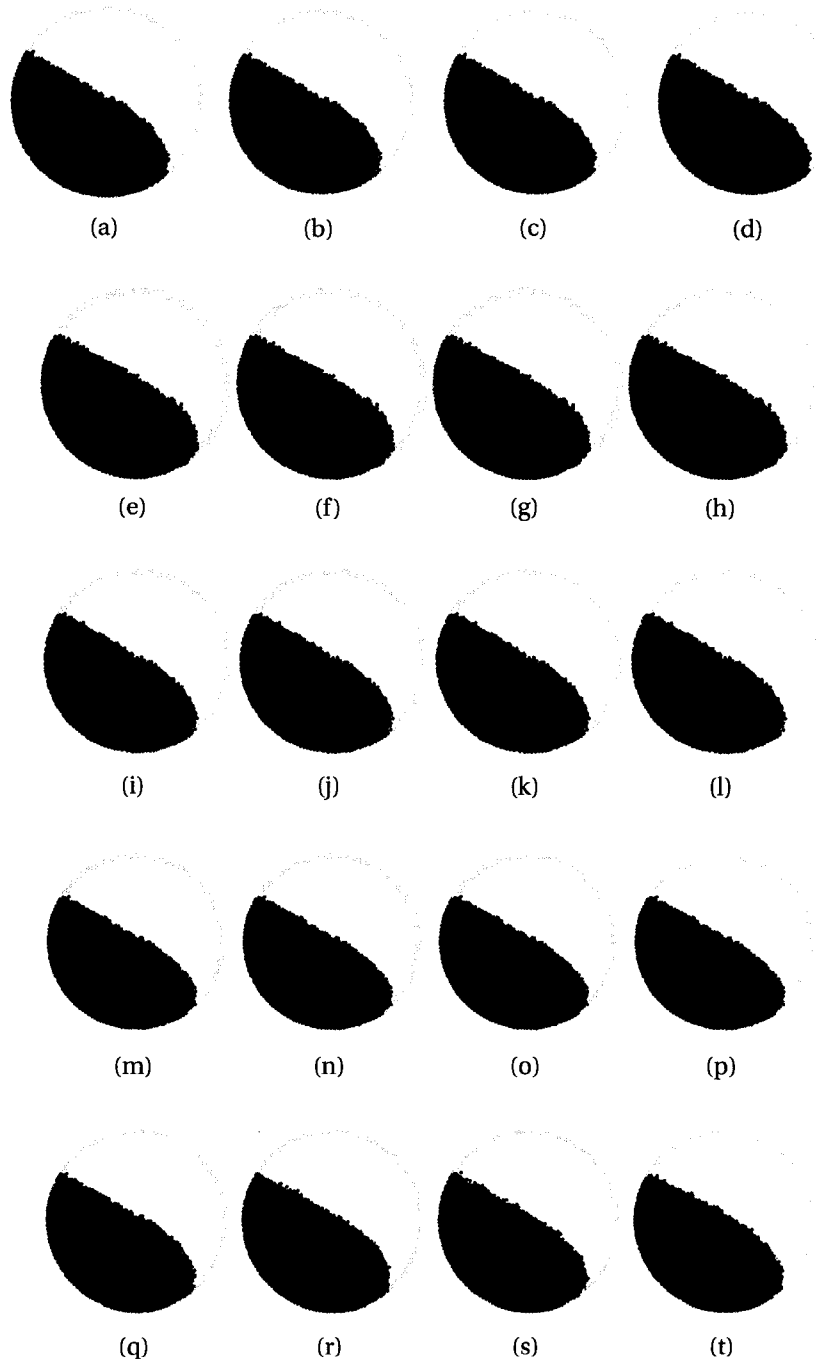


FIG. 8.5 – Distribution des particules dans une section transversale du cylindre après $t = 2, 6, 10, 14$ s. Figures 8.5(a)-8.5(d), 8.5(e)-8.5(h), 8.5(i)-8.5(l), 8.5(m) et 8.5(p) sont obtenues avec DEM-MPM ($\tau = 4$ s, $N_{LT} = 2$) et $N = 253, 1813, 3587$ et 5595 cellules, respectivement. Les figures 8.5(q)-8.5(t) sont obtenues avec la DEM.

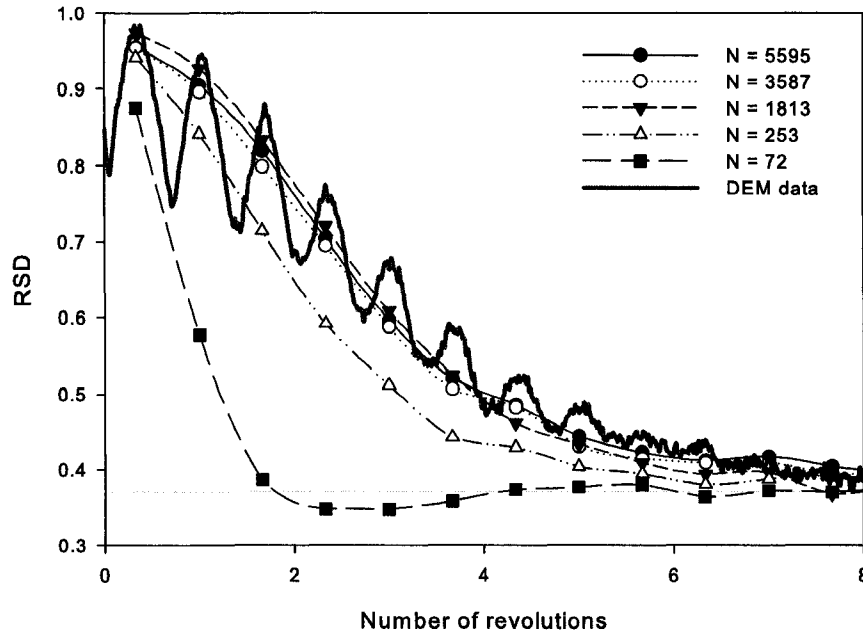


FIG. 8.6 – Effet du nombre d'états N sur la précision de la DEM-MPM.

8.3.3 Effet du temps d'apprentissage

Afin d'évaluer l'effet du temps d'apprentissage $T = N_{LT}\tau$ sur la matrice de transition \mathbf{P} , nous notons par $\mathbf{P}(N_{LT})$ la matrice obtenue en appliquant l'Eq. 8.8 afin de calculer chacune de ses entrées. Nous définissons ensuite la différence relative $\epsilon(N_{LT})$ entre $\mathbf{P}(N_{LT})$ et $\mathbf{P}(N_{LT} + 1)$ par :

$$\epsilon(N_{LT}) = \frac{\|\mathbf{P}(N_{LT}) - \mathbf{P}(N_{LT} + 1)\|_1}{\|\mathbf{P}(N_{LT})\|_1}, \quad (8.13)$$

avec

$$\|\mathbf{P}\|_1 = \sum_{ij} |P_{ij}|. \quad (8.14)$$

Le graphe de ϵ en fonction de N_{LT} pour $\tau = 4s$ est présenté à la figure 8.7 pour différentes valeurs de taille de mailles. Ceci confirme que la différence relative décroît

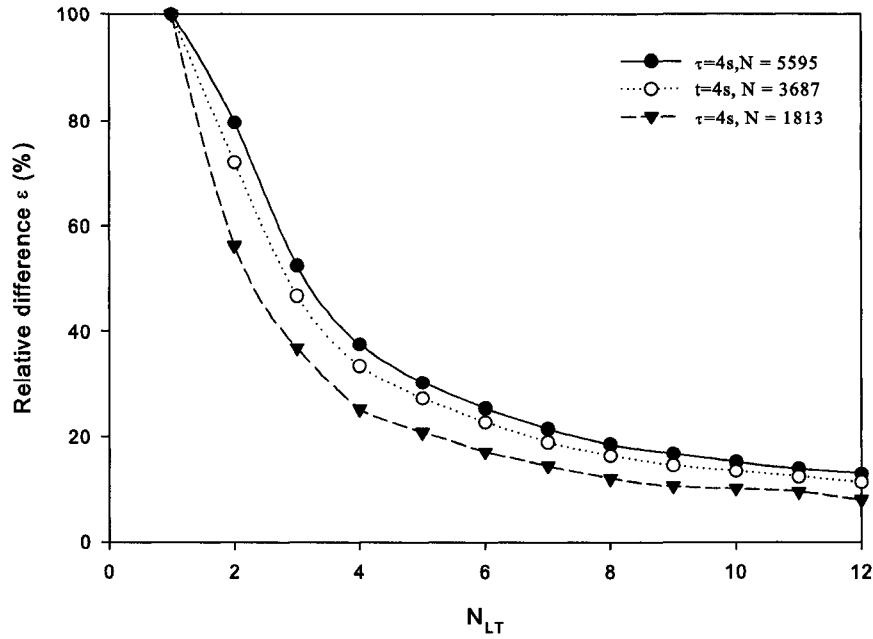


FIG. 8.7 – Graphe de ϵ en fonction de N_{LT} pour $N=5595$, 3587 et 1813, et $\tau = 4s$.

exponentiellement pour des valeurs croissantes de N_{LT} , signifiant que les entrées de la matrice convergent rapidement à des valeurs constantes.

Tel qu'on peut le voir à la figure 8.7, la différence relative est inférieure pour des maillages grossiers. Ceci provient du fait qu'il y a un nombre plus élevé de particules dans des mailles plus grandes, ce qui contribue à stabiliser la matrice plus rapidement puisque chaque état bénéficie d'un nombre plus élevé d'échantillons par transition. En effet, à chaque itération, un nombre de N_p/N particules, en moyenne, est échantillonné par état. La valeur de ϵ pour laquelle il est considéré acceptable de travailler avec la matrice doit donc être fixée avec précaution. En effet, même si la matrice est stable, nous n'avons aucune information au sujet de l'irréductibilité et de l'apériodicité, qui sont des conditions suffisantes pour obtenir un processus markovien convergent (Chung, 1967). De plus, nous devons préciser que la stabilisation de

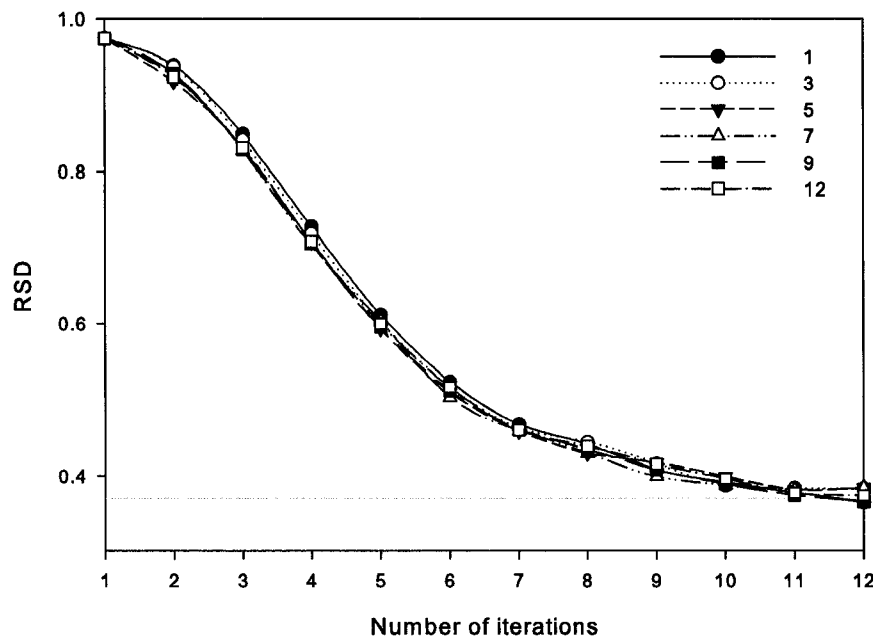


FIG. 8.8 – Effet de N_{LT} sur les courbes de RSD avec $\tau = 4s$ et $N = 1813$.

la matrice de transition n'est pas suffisante pour garantir des prédictions de mélange précises. Ceci est mis en évidence avec les résultats obtenus avec les maillages grossiers aux figures 8.5(d) et 8.5(p).

Dans le cas du mélangeur étudié dans ce chapitre, la figure 8.8 présente les courbes de RSD qui semblent insensibles à une augmentation du temps d'apprentissage T , et montre qu'une seule itération du processus d'apprentissage semble suffisante pour obtenir des résultats acceptables. Des résultats similaires sont observés (non présentés ici) en utilisant davantage de cellules (i.e. $N = 3587$ et 5595). La même conclusion peut être tirée en observant les patrons de mélange, tels que ceux présentés à la figure 8.9.

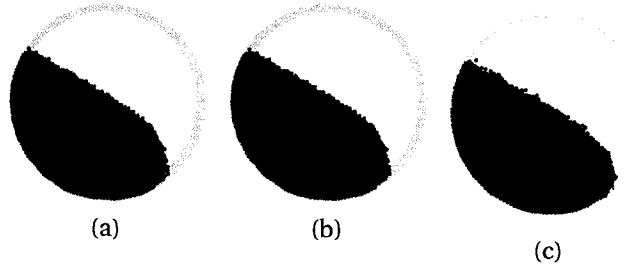


FIG. 8.9 – Distribution de la fonction couleur sur une section transversale d'un mélangeur cylindrique après $t = 6\text{s}$ avec $N = 3587$, $\tau = 4\text{s}$. Figure 8.9(a), $N_{LT} = 1$; figure 8.9(b), $N_{LT} = 12$; figure 8.9(c), résultats DEM.

8.4 Conclusion du chapitre

L'objectif de ce chapitre est d'introduire un modèle de calcul permettant de simuler le mélange de particules monodisperses ayant des propriétés identiques. À ce titre, un modèle utilisant le formalisme des chaînes de Markov a été développé. Avec cette approche, une matrice de transition est construite en utilisant des résultats provenant de la DEM ou de méthodes non intrusives. Cette matrice est ensuite utilisée successivement sur une distribution initiale de particules afin de déterminer leur distribution après un temps donné. Un avantage central de cette méthode réside dans sa simplicité puisque le modèle est linéaire et l'opérateur est relativement facile à construire lorsque l'on dispose de données de bonne qualité. Les résultats obtenus montrent que les modèles stochastiques ont leur place dans l'étude du mélange granulaire puisqu'ils permettent de réduire significativement les efforts de calculs requis et, par extension, peuvent permettre l'étude de systèmes comportant davantage de particules.

En particulier, plusieurs paramètres du modèle développé ont été étudiés, notamment le pas de temps, le nombre d'états dans le processus ainsi que le temps d'apprentissage. Les résultats démontrent que la méthode est consistante, la solution ob-

tenue convergeant effectivement vers les résultats numériques obtenus avec la DEM lorsque le nombre d'états dans le système augmente. Finalement, il a été observé que le temps d'apprentissage a peu d'effet sur les courbes de mélange obtenues. Néanmoins, il est difficile d'extrapoler cette observation puisqu'elle concerne un système relativement simple avec peu de dimensions et il serait imprudent de prétendre que cette caractéristique est commune à tous les types de mélangeurs.

Ce travail s'est restreint au mélange de particules monodisperses et basé sur un processus markovien stationnaire, mais doit être vu comme un pas vers la construction d'outils hybrides avec la DEM pour la simulation du mélange granulaire. Le lien avec les propriétés de mélange de ces systèmes est le sujet du chapitre suivant. Ce chapitre présente les caractéristiques des chaînes markoviennes et leur lien physique avec le mélange.

Chapitre 9

Propriétés de mélange des systèmes granulaires markoviens

La dynamique et l'analyse de systèmes granulaires sont très complexes en raison du nombre élevé de degrés de liberté présents dans ces systèmes. À cet effet, il est bien connu que la DEM, malgré son aspect intuitif, devient rapidement repoussante en raison de l'effort de calcul énorme requis afin d'obtenir des résultats intéressants. En effet, tel que discuté au chapitre précédent, ces approches lagrangiennes sont basées sur la résolution d'équations de mouvement sur chacune des particules présentes dans le système fermé. Ces particules subissent un nombre élevé de collisions entre elles qui produisent une série de déformations élastiques et dissipatives.

Il a été démontré dans le chapitre précédent que sous certaines conditions, il est possible de décrire l'opération de mélange de particules par une chaîne de Markov stationnaire à l'aide d'un opérateur \mathbf{P} qui agit sur une distribution de particules μ_0 dans un espace d'états à N dimensions S . La raison avancée devant le succès de cette approche est que les trajectoires des particules sont apparemment sans mémoire, de

sorte que la position d'une particule dans un futur proche ne dépend pas de son historique de déplacement et que le déterminisme derrière le déplacement des particules est indépendant du temps. Par contre, cette stationnarité n'est pas toujours vraie puisqu'elle dépend du système étudié. Il est clair par exemple qu'un système contenant des particules de tailles différentes se comporte différemment en fonction du temps puisque des phénomènes transitoires de ségrégation apparaissent. Ainsi, puisque la concentration des différentes tailles varie en fonction du temps, le déplacement des particules ne peut être considéré comme stationnaire. Néanmoins, dans le cas qui nous intéresse (i.e. un système monodisperse stationnaire), nous avons vu qu'il est possible de construire une chaîne de Markov discrète avec un pas de temps spécifique τ .

L'objectif de ce chapitre est de déterminer des propriétés de mélange directement à partir de l'opérateur et de les relier à des concepts physiques. En effet, puisque l'opérateur \mathbf{P} représente l'ensemble des transitions dans le système, il est raisonnable de croire qu'un certain nombre de propriétés peut être obtenu à partir de cet opérateur. Le chapitre sera divisé comme suit : certaines définitions seront d'abord introduites, certains exemples seront ensuite revisités et, finalement, appliqués au cas de mélange présenté au chapitre précédent.

9.1 Théorème de la limite des chaînes de Markov

Dans cette section, nous discutons de la notion de convergence des distributions de probabilité vers un point. D'abord, nous allons présenter les concepts d'existence et d'unicité d'une distribution de probabilité stationnaire π sur un espace d'état S tel que $\|\mu_k - \pi\| \rightarrow 0$ lorsque $k \rightarrow \infty$. Dans un deuxième temps, nous allons déterminer la

valeur minimale de k qui assure que, pour un certain $\epsilon > 0$, nous avons $\|\mu_k - \pi\| \leq \epsilon$. En d'autres termes, en mettant en évidence les propriétés de convergence de la chaîne, nous faisons l'hypothèse que nous pourrions déterminer du même coup les propriétés de mélange tels que le temps de mélange et le taux de mélange du système. En effet, il est approprié de croire, *a priori*, que la distribution invariante de probabilité constitue l'état mélangé, i.e. la distribution pour laquelle toute transformation de mélange ne fait que retourner le même état mélangé (nous verrons que cela est vrai sous certaines conditions) et que la vitesse à laquelle la distance entre la distribution de probabilité et cette distribution invariante décroît est reliée à la vitesse de mélange. Nous verrons que cette décroissance est géométrique et qu'elle est effectivement liée au taux de mélange du système. Le coeur de l'analyse présentée est essentiellement basé sur les travaux de Rosenthal (1995) et les références s'y trouvant.

9.1.1 Existence et unicité

Introduisons d'abord quelques définitions qui seront utiles pour l'analyse.

Définition 9.1. *Une chaîne de Markov est dite irréductible (ou non décomposable) si pour toutes les paires $(i, j) \in S^2$, il existe un entier n tel que $p_{ij}^{(n)} > 0$.*

En d'autres termes, une chaîne de Markov est dite irréductible si tous les états communiquent entre eux, i.e. que l'espace d'état $S = \{1, 2, \dots, N\}$ ne contient pas de sous-ensembles fermés autres que l'espace S lui-même, ce qui est lié à la transitivité topologique introduite au chapitre 3. En pratique, pour de grandes matrices, il devient relativement difficile de déterminer si la matrice est irréductible ou non. La propriété suivante sera utile dans ce cas (Varga, 1962).

Définition 9.2. Une matrice \mathbf{A} est dite irréductible si et seulement si il existe une matrice de permutation \mathbf{T} telle que :

$$\mathbf{TAT}^T = \mathbf{R} \quad (9.1)$$

où \mathbf{R} est triangulaire supérieure.

Dans le cas des chaînes de Markov, il est suffisant de montrer que \mathbf{P} est irréductible pour affirmer que la chaîne l'est aussi. Supposons qu'il existe un $d > 0$ tel que pour n'importe quel multiple de d , la probabilité $p_{ii}^{(n)} = 0$ si n est un multiple de d et $0 < p_{ii}^{(n)} \leq 1$ dans le cas contraire. Alors, nous disons que la probabilité d'être dans l'état i en question est périodique de période d .

Définition 9.3. La période de l'état i est le plus grand nombre $d > 0$ pour lequel $p_{ii}^{(d)} > 0$. Une chaîne de Markov est dite périodique s'il existe un tel état i de période d_i .

Remarque 9.1. Si $d_i = 1$ pour tout $i \in S$, alors la chaîne est dite apériodique.

Les définitions présentées plus haut sont requises afin de déterminer les conditions d'existence et d'unicité d'une distribution invariante de probabilité $\boldsymbol{\pi}$. En effet, une condition suffisante pour l'existence et l'unicité de cette distribution est que la chaîne soit irréductible et apériodique (Chung, 1967; Rosenthal, 1995). La chaîne converge alors exponentiellement vers une distribution invariante unique. La première condition est évidente si la matrice de transition est irréductible et l'écoulement est transitif. Il est facile de montrer qu'une matrice stochastique est irréductible. Le théorème de Perron-Frobenius stipule que le rayon spectral d'une matrice irréductible est aussi sa valeur propre maximale $\lambda_0 = 1$ de multiplicité 1. Si, de plus, \mathbf{P} est apériodique, toutes les autres valeurs propres λ_k pour $k > 0$ sont inférieures à 1 en valeur absolue. Aussi, le vecteur propre associé à λ_0 est positif. Il est possible de dé-

montrer, dans le cas d'une chaîne de Markov irréductible et apériodique, que l'unique distribution invariante est donnée par $\pi(i) = 1/N$ pour tout $i \in S$

Définition 9.4. Une chaîne de Markov est dite réversible par rapport à la distribution invariante π si $\pi(i)P_{ij} = P_{ji}\pi(j)$ pour tout $i, j \in S$. Lorsque la chaîne n'est pas réversible, elle est dite irréversible par rapport à π .

Remarque 9.2. Si P est symétrique, donc double stochastique, la chaîne est nécessairement réversible et P n'a que des valeurs propres réelles.

Si la chaîne n'est pas réversible, il est alors nécessaire de calculer le vecteur propre associé à la valeur propre maximale afin d'obtenir la distribution invariante. Il s'en suit alors que le vecteur propre gauche u associé à λ_0 est l'unique distribution invariante de P puisqu'il est la solution du problème aux valeurs propres de la forme :

$$uP = \lambda_0 u, \quad (9.2)$$

où u joue le rôle de la distribution invariante π . En effet, puisque $\lambda_0 = 1$, nous obtenons la limite de la chaîne de Markov donnée par la solution de $\pi P = \pi$.

9.1.2 Taux de convergence et mélange

Un des domaines très actifs dans le domaine des chaînes de Markov touche à l'aspect de taux de convergence de μ_k vers la distribution invariante π , i.e. lorsque $k \rightarrow \infty$. Il a été démontré que les propriétés de convergence de la matrice de transition P sont reliées au spectre des valeurs propres de cette matrice de transition (e.g. Diaconis et Stroock (1991); Rosenthal (1995)). À ce sujet, considérons que les valeurs propres de P

sont notées, en ordre croissant, par :

$$1 = \lambda_0 \geq \lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_{N-1} \geq -1. \quad (9.3)$$

Le taux de convergence vers la limite de la chaîne est égale à la deuxième plus grande valeur propre en valeur absolue (SLEM), donnée par (Boyd et al., 2004) :

$$\lambda_* = \max_{i=1, \dots, N-1} |\lambda_i| = \max\{|\lambda_1|, |\lambda_{N-1}|\} \quad (9.4)$$

Il est possible de montrer que, si \mathbf{P} satisfait $\lambda_* < 1$ et que \mathbf{P} est diagonalisable, alors il existe une constante $C > 0$ telle que la distance entre la distribution de probabilité à l'itération k et la distribution invariante est bornée supérieurement par (Rosenthal, 1995) :

$$\|\mu_k - \pi\| = \sup_{A \subset S} |\mu_k(A) - \pi(A)| \leq C(\lambda_*)^k \quad (9.5)$$

Ce résultat stipule alors que la chaîne de Markov converge géométriquement vers la distribution invariante π . La quantité $-\ln(\lambda_*)$ est alors définie comme le taux de mélange et $\tau = -\ln(\lambda_*)^{-1}$ est appelé le temps de mélange. Ce temps correspond au temps requis par le système pour réduire la distance entre les distributions d'un facteur $e = 2.718\dots$.

9.2 Chaos et chaînes de Markov

La chaîne de Markov présentée plus haut représente la dynamique particulière sur un ensemble d'états S . Il est possible, en effet, d'établir une connexion entre les propriétés des chaînes de Markov et celles d'un système dynamique déterministe (Gaspard, 1998). Toutefois, plusieurs quantités reliées à la dimension sont perdues lors de

la comparaison due au fait que les propriétés géométriques, propres aux systèmes dynamiques différentiables, ne peuvent pas être retrouvées dans une chaîne de Markov. Néanmoins, malgré cette limitation, un intérêt particulier sera porté à l'entropie de Kolmogorov-Sinai (KS) (c.f. chapitre 3) et l'entropie topologique (ou de Ruelle), qui ne requièrent pas la connaissance des exposants de Lyapunov de manière individuelle (lesquels sont directement liés à l'aspect géométrique du système d'équations différentielles). En effet, l'entropie KS est une mesure du taux de perte (ou de gain) d'information dans le système, selon le signe de la valeur obtenue. Il s'agit, en fait, d'après l'inégalité de Ruelle, d'une borne inférieure de la somme des indices de Lyapunov positifs (Ruelle, 1978). Cette entropie est donc reliée à l'entropie thermodynamique classique puisqu'elle propose une mesure du taux d'expansion de trajectoires infiniment voisines dans différentes régions de l'espace (Sprott, 2003). L'entropie topologique, en revanche, constitue une borne supérieure à la somme des indices de Lyapunov (Balmforth et al., 1994).

Considérons maintenant la chaîne de Markov telle que présentée jusqu'à maintenant et sa matrice de transition \mathbf{P} . Considérons également les vecteurs propres gauche et droite de \mathbf{P} associés à la valeur propre $\lambda_0 = 1$, notés respectivement par \mathbf{u} et \mathbf{v}

$$\mathbf{uP} = \mathbf{u}, \quad \mathbf{Pv}^T = \mathbf{v}^T. \quad (9.6)$$

Par définition, nous avons $\|\mathbf{v}\| = \|\mathbf{u}\| = 1$. En utilisant ces vecteurs propres, il est possible de construire la matrice suivante :

$$\mathbf{W}_{ij} = \mathbf{P}_{ij} \left(\frac{v_j}{v_i} \right), \quad (9.7)$$

avec les vecteurs invariants suivants :

$$\xi_i = \frac{u_i v_i}{\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}}. \quad (9.8)$$

On peut démontrer que la matrice \mathbf{W} est stochastique et invariante par la gauche par rapport au vecteur ξ . En se basant sur la définition de l'entropie KS (h_{KS}), nous obtenons (Gaspard, 1998; Lecomte et al., 2005) :

$$h_{KS} = - \sum_{i,j \in S} \xi_i \mathbf{W}_{ij} \ln \mathbf{W}_{ij}, \quad (9.9)$$

Remarque 9.3. *D'après la règle de l'Hospital, il s'en suit que*

$$\lim_{s \rightarrow 0} s \ln s = 0, \quad (9.10)$$

de sorte que l'Eq. 9.9 devient numériquement équivalente à :

$$h_{KS} = - \sum_{\substack{i,j \in S \\ \mathbf{W}_{ij} \neq 0}} \xi_i \mathbf{W}_{ij} \ln \mathbf{W}_{ij}. \quad (9.11)$$

Il est possible d'observer une similarité avec l'Eq. 3.12 pour les systèmes dynamiques déterministes. L'entropie topologique h_{top} est obtenue, pour sa part, par le logarithme de la plus grande valeur propre de la matrice de transition topologique \mathbb{W} associée à la sous-chaîne de Markov \mathbf{W} , i.e. (Balmforth et al., 1994) :

$$\mathbb{W}_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if } \mathbf{W}_{ij} > 0 \\ 0 & \text{if } \mathbf{W}_{ij} = 0 \end{cases} \quad (9.12)$$

9.3 Exemples

9.3.1 Exemple simple non trivial

Considérons une chaîne de Markov simple représentant une marche aléatoire sur un groupe $\mathbb{Z}/(2)$, i.e. les nombres entiers modulo 2 (Rosenthal, 1995). Ce système simple est caractérisé par deux probabilités de transitions p et q reliées à un mouvement

vers la gauche ou vers la droite respectivement. La matrice de transition s'écrit de la façon suivante :

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1-p & p \\ q & 1-q \end{pmatrix} \quad (9.13)$$

Maintenant, considérons un espace d'état $S = \{0, 1\}$ et supposons que le système démarre dans l'état 0, la distribution initiale étant donc $\mu_0(0) = 1$ et $\mu_0(1) = 0$. On peut montrer par récurrence que l'état de la chaîne à n'importe quel moment k est donné par

$$\mu_k(0) = \frac{q}{1-p} + \left(1 - \frac{q}{p+q}\right) (1-p-q)^k, \quad (9.14)$$

$$\mu_k(1) = \frac{p}{p+q} + \left(1 - \frac{q}{p+q}\right) (1-p-q)^k. \quad (9.15)$$

Dans ces expressions, on voit que si $|1-p-q| < 1$, alors le vecteur de distribution de probabilité μ_k converge lorsque $k \rightarrow \infty$, ce qui donne

$$\pi(0) = \frac{p}{p+q}, \quad \pi(1) = \frac{q}{p+q}, \quad (9.16)$$

et la distance entre la distribution μ_k et la distribution invariante π est alors

$$\|\mu_k - \pi\| = \left(1 - \frac{q}{p+q}\right) |1-p-q|^k. \quad (9.17)$$

Plusieurs remarques peuvent être formulées. D'abord, la distance décroît géométriquement vers zéro si $|1-p-q| < 1$. Ensuite, si $p = q = 0$, la chaîne n'est plus irréductible. Finalement, si $p = q = 1$, la chaîne est périodique de période 2, ce qui signifie que le système alterne entre être dans l'état 1 et l'état 0 de sorte qu'il n'y a pas de distribution de probabilité limite lorsque $k \rightarrow \infty^\dagger$.

[†]Un peu comme à la manière d'une fonction périodique $f(x) = \sin(x)$ pour laquelle la limite est indéfinie.

Assumons maintenant que \mathbf{P} est apériodique et irréductible de sorte qu'elle est diagonalisable. On obtient alors les deux valeurs propres suivantes : $\lambda_0 = 1$ et $\lambda_1 = \lambda_* = 1 - p - q$. En utilisant l'Eq. 9.17, il est clair qu'il est possible de trouver une constante $C > 0$ telle que $\|\boldsymbol{\mu}_k - \boldsymbol{\pi}\| \leq C(\lambda_*)^k$, tel que présenté à l'Eq. 9.5.

9.3.2 Mélange statique

Un des premiers travaux expérimentaux impliquant l'utilisation des chaînes de Markov est dû à Chen et Fan (1972). Dans cet article, des particules de verre d'un diamètre de 5/32 po. sont utilisées pour étudier le mélange dans un mélangeur statique. Les particules sont disposées dans un état initial et leur position, après chaque élément de mélange, est déterminée. Le mélange est décomposé en 12 états et les transitions entre ces états sont mesurées expérimentalement en utilisant des traceurs colorés. Puisque la matrice de transition est fournie dans le travail de Chen et Fan (1972), nous proposons d'appliquer la théorie présentée à ce système de mélange simple puisqu'il implique un nombre relativement faible d'états.

Les lignes de la matrice sont d'abord normalisées afin d'assurer qu'elle soit stochastique (certaines lignes ne rencontraient pas cette contrainte). Cette matrice est aussi irréductible selon la définition 9.2. La figure 9.1 présente les valeurs propres de la matrice dans le plan complexe. Il est clair que la distribution limite $\boldsymbol{\pi}$ n'est pas égale à $1/N$ tel que suggéré par les auteurs originalement, principalement parce que les valeurs ne sont pas toutes égales à $1/N$. Ceci est principalement dû au fait que le processus n'est pas irréversible (déf. 9.4).

La figure 9.2 présente l'évolution d'une distribution initiale $\mu(i) = 0$ pour tout $i \neq 7$ et $\mu(7) = 1.0$ (conformément au travail original de Chen et Fan (1972)). Tel qu'observé, la distribution $\boldsymbol{\mu}_k \rightarrow \boldsymbol{\pi}$ lorsque $k \rightarrow \infty$. De même, l'évolution de la distance entre la

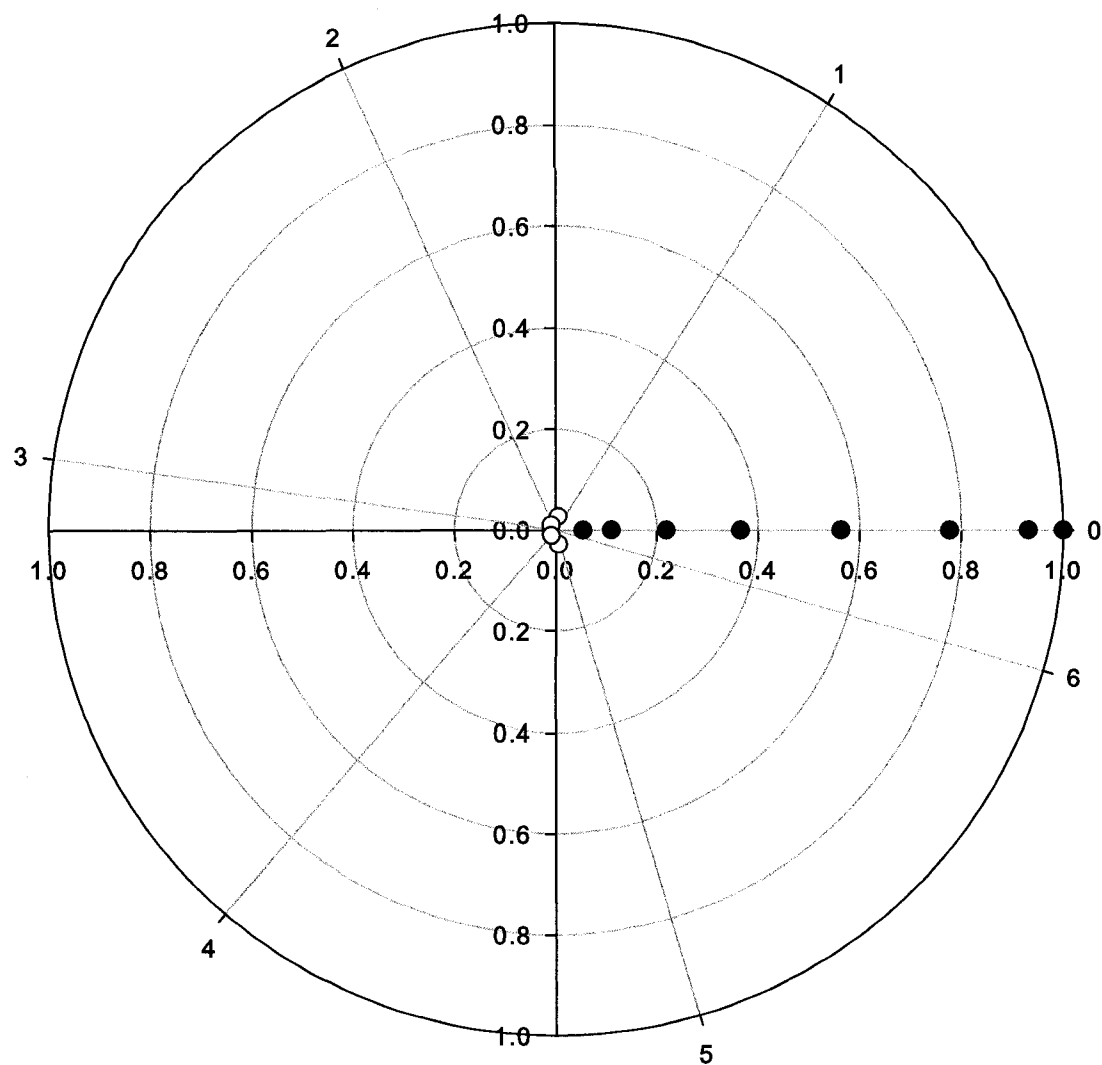


FIG. 9.1 – Spectre des valeurs propres dans le plan complexe obtenu pour la matrice présentée par Chen et Fan (1972).

distribution de probabilité et la distribution invariante introduite dans l'Eq. 9.5 révèle que le taux de décroissance est exponentiel, tel que prévu. Sachant que $\lambda_* = 0.93$, on trouve $C = 0.34 > 0$, de sorte que la distance est toujours bornée supérieurement. La figure 9.3 présente l'évolution de la distance mesurée et l'évolution de la borne supérieure $C(\lambda_*)^k$. De plus, le taux de mélange peut être obtenu par $-\ln \lambda_* = 0.072$ avec un temps de mélange correspondant de 14 itérations. Ceci signifie qu'après 14 itérations, la distance entre la distribution de probabilité à ce moment et la distribution invariante a diminué d'un facteur $1/e$.

Les entropies de Ruelle et de Kolmogorov sont aussi calculées en utilisant la matrice de transition et la procédure présentée plus haut. Nous obtenons alors $h_{top} = 2.10$ qui satisfait le critère $h_{top} \leq \ln(\dim \mathbb{W})$ de Gaspard (1998). De plus, $h_{KS} = 1.613$ indique, par sa valeur positive, la présence de chaos dans le système. Tel qu'attendu, nous avons bien $h_{KS} < h_{top}$.

9.3.3 Mélange dans un cylindre en rotation

Comme exercice final, nous revisitons le cas expérimental présenté dans le chapitre précédent où une chaîne de Markov est construite à partir de résultats obtenus d'une simulation DEM dans un cylindre en rotation.

La matrice de transition considérée est de dimension $N \times N$ avec $N = 5918$, correspondant au nombre d'états occupés par les particules dans le cylindre. Ce nombre élevé d'états permet de bien reproduire les résultats originaux produits par la DEM. Compte tenu de la taille de la matrice, seulement les 6 valeurs propres maximales sont calculées à l'aide d'une routine pour matrices creuses et sont présentées au tableau 9.1. La distribution invariante correspondante à la valeur propre maximale est aussi présentée à la figure 9.4.

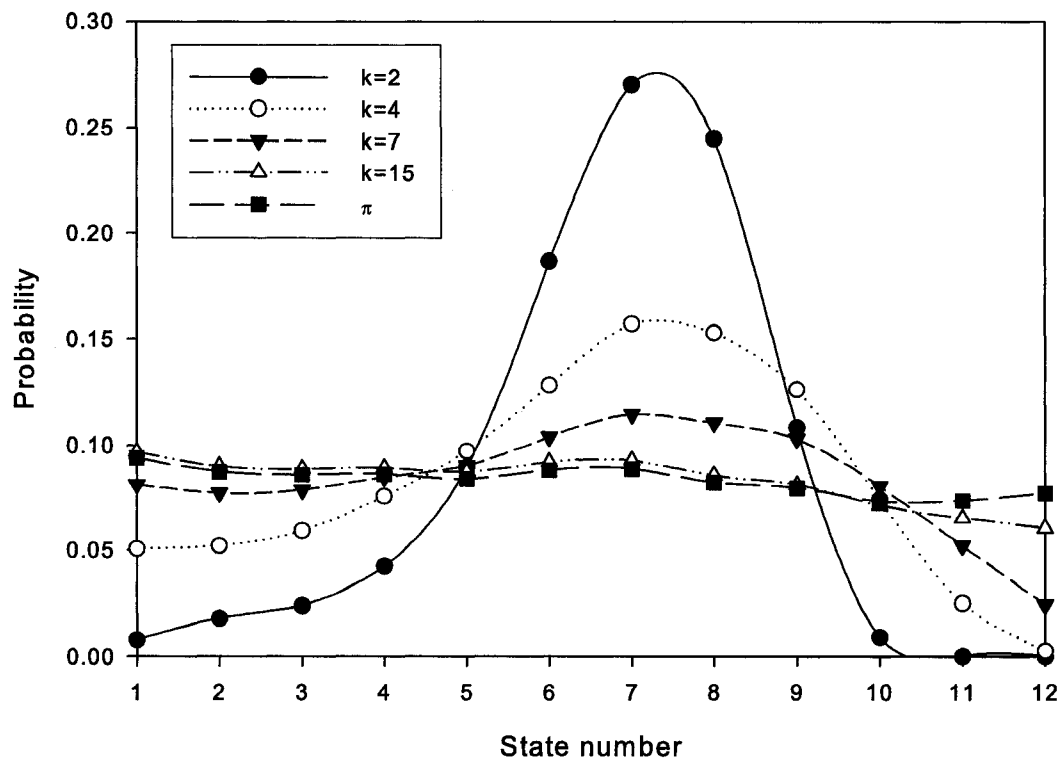


FIG. 9.2 – Évolution de la distribution de probabilité en fonction du nombre d'itérations et distribution invariante π obtenue par le premier vecteur propre gauche de \mathbf{P}

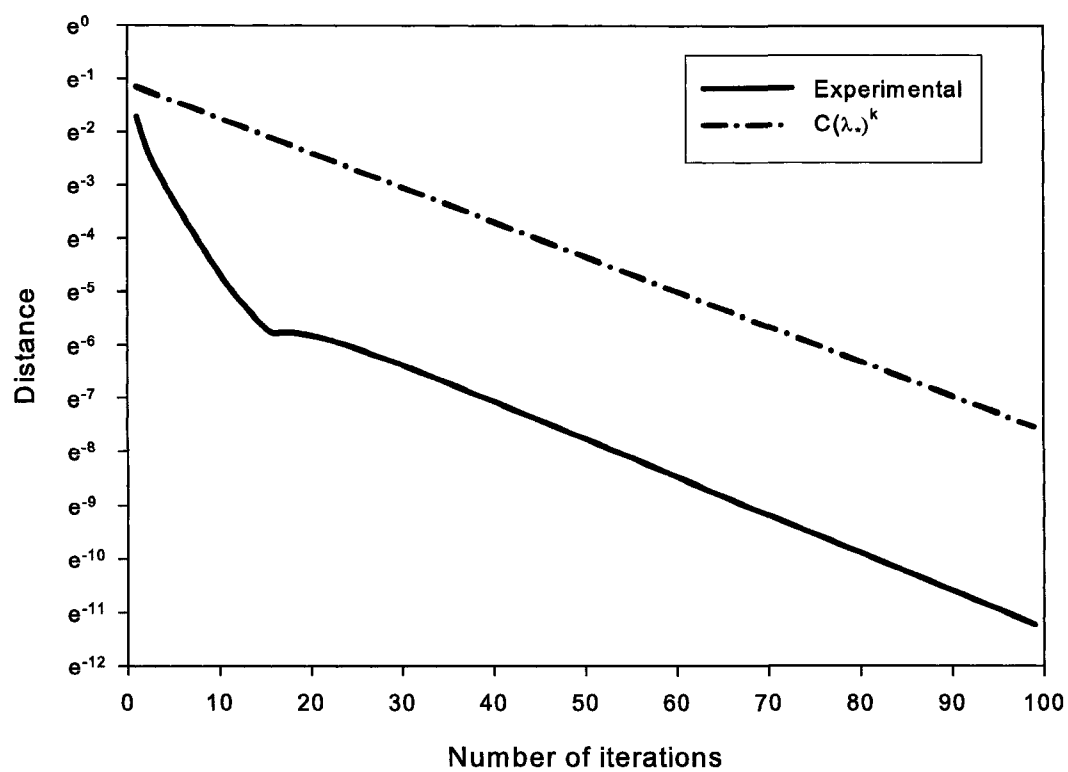


FIG. 9.3 – Évolution de la distance entre la distribution de probabilités μ_k et π . La figure présente aussi la borne supérieure calculée.

TAB. 9.1 – Valeurs propres maximales de \mathbf{P} .

Valeurs	
λ_0	1.0000
λ_1	0.9962
λ_2	0.9831
λ_3	0.9677
λ_4	0.9698
λ_5	0.9697

Un regard attentif au spectre de valeurs propres révèle que la SLEM correspond à une valeur de $\lambda_* = 0.9962$, ce qui confirme que le taux de convergence vers la distribution invariante (où l'état mélangé) est donné par $-\ln \lambda_* = 0.0038$ et que le temps de mélange correspondant est $\tau = 263$ itérations. Finalement, nous complétons l'analyse en calculant les entropies qui sont $h_{top} = 3.717$ et $h_{KS} = 1.01$. Basés sur ces informations, nous pouvons affirmer que le mélange est plus efficace dans le cas du mélangeur statique que dans celui du mélangeur cylindrique, le taux de mélange étant supérieur d'un facteur 20 dans le premier cas.

9.4 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons proposé une analyse originale du mélange basé sur l'observation des propriétés de l'opérateur \mathbf{P} lié au processus de Markov correspondant au système. En utilisant des éléments de la théorie des chaînes de Markov, un parallèle a été établi entre les propriétés de mélange du système (i.e. temps de mélange, taux de mélange, existence d'un état mélangé) et les propriétés du spectre de valeurs propres de l'opérateur. D'autres propriétés dynamiques ont pu également être

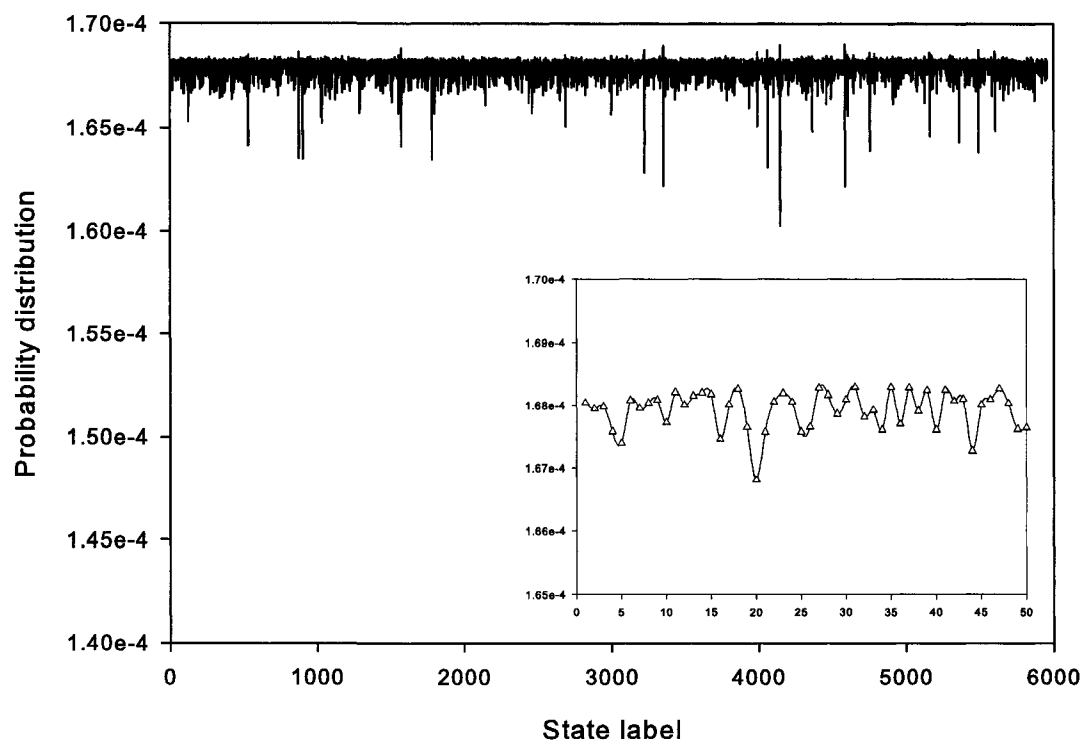


FIG. 9.4 – Distribution invariante obtenue dans le cylindre.

dérivées à partir de la matrice telles que les entropies KS et topologiques. Ces dernières constituent des quantités importantes en mélange puisqu'elles représentent les bornes supérieures et inférieures à la somme des indices de Lyapunov, respectivement.

Chapitre 10

Conclusion et recommandations

10.1 Conclusion générale

La mesure du mélange dans les matériaux granulaires occupe une place importante dans les étapes de développement d'un nouveau produit impliquant ces matériaux. Nous avons présenté différents outils permettant de quantifier le niveau de mélange dans les systèmes granulaires. L'approche basée sur les outils de la théorie du chaos révèle d'importantes caractéristiques de la dynamique des particules en mouvement en dénombrant le nombre de dimensions actives dans le système, le niveau de sensibilité aux conditions initiales par le calcul des exposants de Lyapunov ainsi que les entropies dynamiques. Ces analyses ont été effectuées sur des séries de données obtenues par le développement d'outils de mesure non-intrusifs basés sur le suivi de particules radioactives.

Certaines limitations quant aux informations fournies par ces différents outils nous ont menés à nous questionner sur l'existence d'une mesure invariante à une autre échelle de temps et d'espace que celles à laquelle s'appliquent les outils de la théorie

des systèmes dynamiques. En particulier, nous avons développé une mesure basée sur l'analyse par composantes principales et appliquée sur un ensemble d'observables caractéristiques, soit les positions initiale et instantanée des particules et leurs propriétés. Cette mesure est, par construction, une borne supérieure de la courbe de mélange puisqu'elle mesure la corrélation dans un repère constitué des directions principales, ce qui la rend du coup invariante.

Les méthodes basées sur le suivi lagrangien de particules (e.g. RPT) souffrent de limites importantes dans le contexte du mélange impliquant des particules où la ségrégation se manifeste. Ceci cause en fait l'apparition de zones disjointes à l'intérieur du système de sorte que les particules s'organisent en fonction de leur taille, leur densité et potentiellement d'autres propriétés. Nous avons donc développé une technique de mesure basée sur un ensemble de particules radioactives (e.g. BRPT) qui permet de suivre l'évolution du mélange radial et axial dans un mélangeur. Cette approche permet de retrouver le profil de concentration en traceurs injectés à l'aide de la mesure de radioactivité. La grande précision de la méthode sur les mesures de concentration d'échantillons, i.e. $< 0.005\%$ massique, ouvre des avenues inexplorées. En particulier, son insensibilité à la taille des particules permet maintenant l'étude des poudres fines de moins de $200\ \mu\text{m}$, ce qui était difficile avec d'autres méthodes lagrangiennes non-intrusives (i.e. les méthodes vélocimétriques classiques).

La seconde partie de la thèse explore le domaine de la modélisation du mélange granulaire dans des régions denses à l'aide de la méthode des éléments discrets (DEM). Nous discutons en particulier de l'effet du pas de temps sur la précision des simulations et leur impact au niveau macroscopique. Nous montrons que le pas de temps minimal typique (généralement choisi sur un critère empirique) est trop grand et mène à des erreurs systématiques sur les profils de vitesse, de température granulaire

ainsi que sur les courbes de mélange. Nous dérivons la relation entre la borne supérieure de l'erreur numérique et les paramètres adimensionnels de l'équation de mouvement des particules dans le cas de collisions binaires et multiples.

Finalement, afin de fermer la boucle de l'analyse du mélange dans les systèmes granulaires, une approche basée sur la théorie des opérateurs markoviens est développée. Un opérateur linéaire, sous la forme d'une matrice de transition, est construit et ses caractéristiques, dont la dimension de l'espace d'état, le temps d'apprentissage ainsi que le pas de temps caractéristique sont largement étudiées. Ensuite, les outils d'analyse matricielle sont appliqués afin d'extraire des informations sur le temps de mélange, la présence de zones disjointes, la distribution finale de concentration à l'état mélangé (point fixe) ainsi que les entropies KS et topologique (Ruelle). Ces entropies sont des mesures des bornes inférieure et supérieure de la somme des exposants de Lyapunov, respectivement.

10.2 Travaux futurs

À la suite de cette thèse, plusieurs projets de recherche doivent émerger.

1. Le mélange de poudres fines de $<200 \mu\text{m}$ peut maintenant être étudié à l'aide d'une méthode non-intrusive (BRPT) avec des particules radioactives identiques aux particules inertes. On peut penser appliquer cette technique dans plusieurs autres domaines dont, par exemple :
 - Les systèmes polyphasiques en général ;
 - La granulation : l'insertion de solutions radioactives permettrait de suivre la dispersion de la phase aqueuse dans différentes sections du granulateur ;
 - L'enrobage : une solution d'enrobage activée permettrait de suivre la distri-

bution d'épaisseur d'enrobage sur toutes les poudres échantillonnées dans différentes sections de l'enrobeur ;

- Les technologies de procédé (PAT) : il n'est pas impossible de penser développer des outils de suivi de procédé basés sur la BRPT. La très grande précision de la méthode ouvre la porte à tout le domaine de l'instrumentation et du contrôle des procédés impliquant, en particulier, le mélange des particules.
2. Certaines améliorations à la méthode de la BRPT pourraient porter sur la recherche de nouveaux isotopes potentiels pour des formulations ne contenant pas de sodium. On pourrait penser développer une méthodologie spécifique pour le suivi d'une molécule représentant un actif pharmaceutique par exemple, ou certains lubrifiants, dont le stéarate de magnésium. Ce cas est exemplaire puisque le magnésium, lorsqu'activé, se décompose et forme du Na-24 ;
 3. Les outils de caractérisation du mélange développés dans le contexte granulaire, de pair avec la mesure invariante présentée, pourraient être appliqués directement sur différents systèmes de mélange afin de caractériser quantitativement leur performance ;
 4. Le code de simulation de la DEM est mûr pour l'introduction de nouvelles fonctionnalités permettant la simulation de cas plus complexes.

Particules non-sphériques : L'écoulement de particules non-sphériques (dans une région quasi-sphérique), i.e. pour lesquelles la projection demeure généralement convexe et le facteur de forme est relativement voisin de 1. Un modèle stochastique simple pourrait potentiellement être développé et appliqué en conjonction avec une mesure spécifique de non sphéricité. Ainsi, lors d'un contact, ce modèle déterminerait la déviation du vecteur normal par rapport à celui d'une sphère. Ces déviations proviendraient

d'une distribution mesurée sur une particule modèle. On pourrait penser valider cette approche avec des cas de collisions binaires simples à l'aide de calculs détaillés de déformations de particules non-sphériques par éléments finis.

Cohésion par ponts liquides en régime pendulaire : Ce cas est largement documenté dans la littérature et pourrait être implanté systématiquement. Le problème provient des capacités de validation. Ce travail a été bien amorcé dans le cas non-cohésif dans le cadre de cette thèse. De plus, les capacités expérimentales ont été augmentées par le développement de la BRPT entre autres.

5. Le développement de méthodes d'analyse basées sur les fonctions de *mapping* en fluide se justifie par la simplicité d'utilisation pour la caractérisation du mélange. Néanmoins, les approches développées en fluide ne considèrent pas les propriétés de l'opérateur pour la quantification du mélange, mais plutôt un lâché de particules avec différentes conditions initiales. Un travail pourrait être fait en vue d'appliquer le formalisme développé dans le cadre de la théorie des chaînes de Markov présenté dans cette thèse aux fonctions de *mapping*. D'autres cas de mélanges mono ou polyphasiques pourraient aussi être étudiés et caractérisés à l'aide de cette approche.
6. Les travaux présentés au chapitre 6 ont porté sur la sensibilité des résultats de simulation par rapport aux coefficients de friction mur-particule et particule-particule dans différentes géométries de silos et trémies. Nous avons également observé que le coefficient de friction est un paramètre sensible pour les profils de vitesse dans ce genre de système, bien que la détermination de ce paramètre est difficile en pratique. Il serait impératif de développer des méthodes de me-

sure directes ou indirectes de ces paramètres afin de bien alimenter le modèle DEM. Dans le cas des mesures directes, certains travaux ont déjà été amorcés avec le département de génie physique afin de mesurer localement le coefficient de friction à l'aide d'un nanoindenteur. Cette avenue est à privilégier puisqu'elle permet des mesures à l'échelle locale, i.e. au point de contact, du coefficient de friction entre les particules. Une autre avenue, cette fois à l'aide d'une mesure indirecte, consisterait à utiliser des silos et trémies identifiées dans le cadre de cette thèse. En mesurant le profil de vitesse et les débits de vidange, on pourrait ainsi déterminer les coefficients de friction requis pour obtenir les profils de vitesse mesurés. On pourrait également considérer des agencements de silos/trémies pour obtenir une mesure significative et reproductible de ces coefficients.

7. Finalement, la DEM est de plus en plus utilisée pour l'investigation de structures et l'établissement de modèles empiriques constitutifs. Par exemple, certains groupes de recherche travaillent à vérifier certaines hypothèses posées pour le développement de modèles basés sur les théories cinétiques (e.g. distribution maxwellienne des vitesses, équipartition de l'énergie) dans le cas des écoulements à faible densité. Dans d'autres cas, il s'agit d'une approche pour la mesure de la relation entre le taux de cisaillement et le tenseur de contrainte, un peu à la manière de ce qui se fait en fluide. Certains travaux de ce genre émergent, notamment dans le cas des particules non-sphériques pour lesquelles des relations contrainte/taux de cisaillement ont été dérivée à partir des modèles non-sphériques basés sur la DEM. À ce titre, un résultat intéressant est que, dans des régimes à faible densité et élastique, les courbes contrainte/taux de cisaillement sont corrélées avec un certain facteur de forme. Il serait donc possible d'adop-

ter les modèles sphériques issus des théories cinétiques en utilisant ce facteur de forme et ainsi retrouver la contrainte subie en fonction du taux de cisaillement. Il serait donc de mise d'envisager une approche eulérienne en orientant l'usage de la DEM au développement de modèles constitutifs empiriques plus accessibles pour l'ingénierie d'usage.

Bibliographie

ALEXANDER, A., MUZZIO, F. J., SHINBROT, T. 2003. «Segregation patterns in V-blenders». *Chemical Engineering Science*. 58. 487–496.

ALEXANDER, A., SHINBROT, T., JOHNSON, B., MUZZIO, F. J. 2005. «V-blender segregation patterns for free-flowing materials : effects of blender capacity and fill level». *International Journal of Pharmaceutics*. 269. 19–28.

ALEXANDER, A. W., CHAUDHURI, B., FAQIH, A., MUZZIO, F. J., DAVIES, C., TOMASSONE, M. S. 2006. «Avalanching flow of cohesive powders». *Powder Technology*. 164. 13–21.

AMAROUCHENE, Y., BOUDET, J. F., KELLAY, H. 2001. «Dynamic sand dunes». *Physical Review Letters*. 86. 4286–4289.

AOUN-HABBACHE, M., AOUN, M., BERTHIAUX, H., MIZONOV, V. 2002. «An experimental method and a Markov chain model to describe axial and radial mixing in a hoop mixer». *Powder Technology*. 128. 159–167.

ARRATIA, P.E., DUONG, N.-H., MUZZIO, F. J., GODBOLE, P., REYNOLDS, S. 2006. «A study of the mixing and segregation mechanisms in the bohle tote blender via DEM simulations». *Powder Technology*. 164. 50–57.

ASMAR, B. N., LANGSTON, P. A., MATCHETT, A. J. 2002. «A generalized mixing index in

- distinct element method simulation of vibrated particulate beds.» *Granular Matter*. 4. 128–138.
- AVALOSSE, Th., CROCHET, M.J. 1997. «Finite-element simulation of mixing : 2. three-dimensional flow through a kenics mixer». *AIChE Journal*. 43 :3.
- BALMFORTH, N. J., SPIEGEL, E. A., TRESSER, C. 1994. «Topological entropy of one-dimensional maps : approximations and bounds». *Physical Review Letters*. 72. 0031–9007.
- BEAM, G. B., WIELOPOLSKI, L., GARDNER, R. P., VERGHESE, K. 1978. «Monte carlo calculation of efficiencies of right-circular cylindrical nai detectors for arbitrarily located point sources.» *Nuclear Instruments and Methods*. 154 :3. 501 – 508.
- BERTHIAUX, H., MIZONOV, V., ZHUKOV, V. 2005. «Application of the theory of Markov chains to model different processes in particle technology». *Powder Technology*. In press.
- BERTRAND, F., LECLAIRE, L.-A., LEVECQUE, G. 2005. «DEM-based models for the mixing of granular materials». *Chemical Engineering Science*. 60. 2517–2531.
- BEVERLOO, W. A., LENIGER, H. A., DE VELDE, J. V. 1961. *Chemical Engineering Science*. 15. 260–.
- BOYD, S., DIACONIS, P., XIAO, L. 2004. «Fastest mixing Markov chain on a graph». *SIAM Review*. 46. 667–689.
- BROADBENT, C.J., BRIDGWATER, J., PARKER, D.J., KENINGLEY, S.T., KNIGHT, P. 1993. «Phenomenological study of a batch mixer using a positron camera». *Powder Technology*. 76 :3. 317 – 329.

- BRONE, D., ALEXANDER, A., MUZZIO, F. J. 1998. «Quantitative characterization of mixing of dry powders in V-blenders». *AIChE J.* 44. 271–78.
- CABARET, F., BONNOT, S., FRADETTE, L., TANGUY, F. A. 2007. «Mixing time analysis using colorimetric methods and image processing». *Industrial Engineering and Chemistry Research.* 46. 5032–5042.
- CASSANELLO, M., LARACHI, F., GUY, C., CHAOUKI, J. 1996. «Solids mixing in gas-liquid-solid fluidized beds : experiments and modeling». *Chemical Engineering Science.* 51 :10 pt A. 2011 – 2020.
- CASSANELLO, M., LARACHI, F., LEGROS, R., CHAOUKI, J. 1999. «Solids dynamics from experimental trajectory time-series of a single particle motion in gas-spouted beds». *Chemical Engineering Science.* 54 :13-14. 2545 – 2554.
- CASSANELLO, M., LARACHI, F., MARIE, M.-N., GUY, C., CHAOUKI, J. 1995. «Experimental characterization of the solid phase chaotic dynamics in three-phase fluidization». *Industrial and Engineering Chemistry Research.* 34 :9. 2971 – 2980.
- CHAOUKI, J., LARACHI, F., DUDUKOVIC, M. P. 1997. «Noninvasive tomographic and velocimetric monitoring of multiphase flows». *Industrial and Engineering Chemistry Research.* 36 :11. 4476 – 4503.
- CHEN, S. J., FAN, L. T. 1972. «The mixing of solid particles in a motionless mixer : a stochastic approach». *AIChE Journal.* 18 :5. 984–989.
- CHOI, J., KUDROLLI, A., BAZANT, M. Z. 2005. «Velocity profile of granular flows inside silos and hoppers». *Journal of physics : condensed matter.* 17.

- CHOU, C. H., JOHNSON, J. R., RIPPKE, E. G. 1977. «Polydisperse particulate solids mixing and segregation : nonstationary Markov chains». *Journal of Pharmaceutical Science*. 66. 104–106.
- CHUNG, Kai Lai. 1967. *Markov Chains with stationary transition probabilities*. Springer-Verlag.
- CLEARY, Paul W., METCALFE, Guy, LIFFMAN, Kurt. 1998. «How well do discrete element granular flow models capture the essentials of mixing?» *Applied Mathematical Modelling*. 22. 995–1008.
- CUNDALL, P. A., STRACK, O. D. L. 1979. «A discrete numerical model for granular assemblies.» *Geotechnique*. 29. 47–65.
- DANCKWERTS, P. V. 1952. «The definition and measurement of some characteristics of mixtures». *Applied Science Research*. 3. 279–296.
- DAW, C. S., HALOW, J. S. 1992. «Modeling deterministic chaos in gas fluidized beds». *AIChE J*. 289. 61–69.
- DAW, C. S., LAWKINS, W. F., DOWNING, D. J., CLAPP, N. E. 1990. «Chaotic characteristics of a complex gas-solid flow». *Physical Review A*. 41. 1179–1181.
- DE WIJN, A. S. 2005. «Kolmogorov-Sinai entropy for dilute systems of hard particles in equilibrium». *Physical Review E*. 71. 046211.
- DEGALEESAN, S., DUDUKOVIC, M.P., PAN, Y. 2002. «Application of wavelet filtering to the radioactive particle tracking technique». *Flow Measurement and Instrumentation*. 13 :1-2. 31 – 43.

- DELAPLACE, G., BOUVIER, L., MOREAU, A., GUÉRIN, R., LEULIET, J.-C. 2004. «Determination of mixing time by colourimetric diagnosis - application to a new mixing system». *Experiments in Fluids*. 36. 437–443.
- DEVANEY, R. L. 1988. *An Introduction to Chaotic Dynamical Systems*. Addison-Wesley.
- DHATT, G., TOUZOT, G. c1981. *Une présentation de la méthode des éléments finis*. Québec, Québec : Les presses de l'Université Laval Québec.
- DIACONIS, P., STROOCK, D. 1991. «Geometric bounds of eigenvalues of Markov chains». *The annals of applied probability*. 1. 36–61.
- DING, Y. L., FORSTER, R. N., SEVILLE, J. P. K., PARKER, D. J. 2001. «Scaling relationships for rotating drums». *Chemical Engineering Science*. 56. 3737–3750.
- DOUCET, J., CHAOUKI, J., BERTRAND, F. 2005. «An extended radioactive particle tracking method for systems with irregular moving boundaries». *Submitted to Powder Technology*.
- DUFFY, James W. 2000. «Statistical mechanics, kinetic theory, and hydrodynamics for rapid granular flow». *J. Phys. : Condens. Matter*. 12. A47–A56.
- ECKMANN, J.-P., RUELLE, D. 1985. «Ergodic theory of chaos and strange attractors». *Reviews of Modern Physics*. 57. 617–656.
- FARMER, J. D., OTT, E., YORKE, J. A. 1983. «The dimension of chaotic attractors». *Physica D*. 7. 153–180.
- FIELD, G.M., BRIDGWATER, J., BEYNON, T.D., BOTTERILL, J.S.M. 1991. «Mechanics of powder mixing using positron emission tomography». *Nuclear Instruments and Me-*

- thods in Physics Research, Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 310 :1-2. 435 –.
- FORREST, S., BRIDGWATER, J., MORT, Paul R., LITSTER, J., PARKER, D. J. 2003. «Flow patterns in granulating systems». *Powder Technology*. 130 :1-3. 91 – 96.
- FRAIGE, F. Y., LANGSTON, P. A. 2004. «Integration schemes and damping algorithms in distinct element models». *Advanced Powder Technology*. 15 :2. 227–245.
- FRANJIONE, J. G., OTTINO, J. M. 1987. «Feasibility of numerical tracking of material lines and surfaces in chaotic flows». *Physics of fluids*. 30. 3641–.
- GASPARD, P. 1998. *Chaos, scattering and statistical mechanics*. Cambridge Non-Linear Science Series 9.
- GILCHRIST, J. F. 2003. *Geometric Aspects of mixing and segregation in granular tumblers*. Thèse de doctorat en, Northwestern University.
- GILCHRIST, J. F., OTTINO, J. M. 2003. «Competition between chaos and order : Mixing and segregation in a spherical tumbler». *Physical Review E*. 68. 061303.
- GODA, T. J., EBERT, F. 2005. «Three-dimensional discrete element simulations in hoppers and silos». *Powder Technology*. 158. 58–68.
- GODFROY, L., LARACHI, F., KENNEDY, G., GRANDJEAN, B., CHAOUKI, J. 1997. «On-line flow visualization in multiphase reactors using neural networks». *Applied Radiation and Isotopes*. 48 :2. 225 – 235.
- GRACE, J. R., TAGHIPOUR, F. 2004. «Verification and validation of CFD models and dynamic similarity for fluidized beds». *Powder Technology*. 139. 99–110.

- GRASSBERGER, P., PROCACCIA, I. 1983a. «Characterization of strange attractors». *Physical Review Letters*. 50. 346–349.
- GRASSBERGER, P., PROCACCIA, I. 1983b. «Estimation of the Kolmogorov entropy from chaotic signal». *Physical Review A*. 28. 2591–2593.
- GRASSBERGER, P., PROCACCIA, I. 1983c. «Measuring strangeness of strange attractors». *Physica D*. 9. 189–208.
- HAY, J. M., HUDSON, C., BRIENS, C. L. 1996. «Correlation dimension for a gas-liquid contactor». *The Chemical Engineering Journal*. 64. 157–167.
- HAY, J. M., NELSON, B. H., BRIENS, C. L., BERGOUNOU, M. A. 1995. «The calculation of the characteristics of a chaotic attractor in a gas-solid fluidized bed». *Chemical Engineering Science*. 50. 373–380.
- HEMPH, R., VAN WACHEM, B., ALMSTEDT, A.-E. 2006. «DEM modeling of hopper flows : comparison and validation of models and parameters». *Proceedings of the 5th World Congress on Particle Technology*.
- HENICHE, M., TANGUY, P. A., REEDER, M. E., FASANO, J. B. 2005a. «Numerical investigation of blade shape in static mixing». *AIChE Journal*. 51. 44–58.
- HENICHE, M., TANGUY, P. A., REEDER, M. E., FASANO, J. B. 2005b. «Numerical investigation of blade shape in static mixing». *AIChE Journal*. 51 :1. 44 – 58.
- HENICHE, Mourad, TANGUY, Philippe A. 2006. «A new element-by-element method for trajectory calculations with tetrahedral finite element meshes». *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 67 :9. 1290 – 1317.

- HILL, K. M., KHAKHAR, D. V., GILCHRIST, J. E., MCCARTHY, J. J., OTTINO, J. M. 1999. «Segregation-driven organization in chaotic granular flows». *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. 96. 11701–11706.
- HIRSHFELD, D., RAPAPORT, D. C. 2001. «Granular flow from a silo : Discrete-particle simulations in three dimensions.» *The European Physical Journal E*. 4.
- HISEMAN, M.J.P, LAURENT, B.F.C., BRIDGWATER, J., WILSON, D.I., PARKER, D.J., NORTH, N., MERRIFIELD, D.R. 2002. «Granular flow in a planetary mixer». *Chemical Engineering Research and Design*. 80 :5. 432 – 440.
- INGRAM, A., SEVILLE, J.P.K., PARKER, D.J., FAN, X., FORSTER, R.G. 2005. «Axial and radial dispersion in rolling mode rotating drums». *Powder Technology*. 158. 76–91.
- JAIN, N. 2004. *Flow dynamics and Segregation of Dry Granular Materials and Slurries*. Thèse de doctorat en, Northwestern University.
- JENKINS, J. T., SAVAGE, S. B. 1983. «A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic spherical particles». *Journal of Fluid Mechanics*. 130. 187–202.
- JONES, J.R., BRIDGWATER, J. 1998. «Case study of particle mixing in a ploughshare mixer using positron emission particle tracking». *International Journal of Mineral Processing*. 53 :1-2. 29 – 38.
- KHAKHAR, D. V., MCCARTHY, J. J., GILCHRIST, J. E., OTTINO, J. M. 1999. «Chaotic mixing of granular materials in 2D tumbling mixers». *Chaos*. 9. 193–205.
- KIARED, K., LARACHI, F., GUY, C., CHAOUKI, J. 1997. «Trajectory length and residence-time distributions of the solids in three-phase fluidized beds». *Chemical Engineering Science*. 52 :21-22. 3931 – 3939.

KNOLL, F., Glenn. 2000. *Radiation Detection and Measurement*. 3^e éd. John Wiley and Sons.

KUO, H. P., KNIGHT, P. C., PARKER, D. J., SEVILLE, J. P. K. 2005. «Solids circulation and axial dispersion of cohesionless particles in a V-mixer». *Powder Technology*. 152. 133–140.

KUO, H. P., KNIGHT, P. C., PARKER, D. J., TSUJI, Y., ADAMS, M. J., SEVILLE, J. P. K. 2002. «The influence of DEM simulation parameters on the particle behaviour in a V-mixer». *Chemical Engineering Science*. 57. 3621–3638.

KUO, H.P., KNIGHT, P.C., PARKER, D.J., ADAMS, M.J., SEVILLE, J.P.K. 2004. «Discrete element simulations of a high-shear mixer». *Advanced Powder Technology*. 15 :3. 297 – 309.

LANDRY, J. W., GREST, G. S., SILBERT, L. E., PLIMPTON, S. J. 2003. «Confined granular packings : structures, stress and forces». *Physical Review E*. 67. 041303.

LARACHI, F., CASSANELLO, M., CHAOUKI, J., GUY, C. 1996. «Flow structure of the solids in a 3D gas-liquid-solid fluidized bed». *AIChE Journal*. 42 :9. 2439 – 2452.

LARACHI, F., CASSANELLO, M., MARIE, M., CHAOUKI, J., GUY, C. 1995a. «Solids circulation patterns in three-phase fluidized beds containing binary mixtures of particles as inferred from rpt». *Chemical Engineering Research and Design, Transactions of the Institute of Chemical Engineers, Part A*. 73 :A3. 263 – 268.

LARACHI, F., CHAOUKI, J., KENNEDY, G. 1995b. «3D mapping of solids flow fields in multiphase reactors with rpt». *AIChE Journal*. 41 :2. 439 – 443.

- LARACHI, F., KENNEDY, G., CHAOUKI, J. 1994. «Gamma-ray detection system for 3D particle tracking in multiphase reactors». *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. A338 :2-3. 568 – 576.
- LAURENT, B., BRIDGWATER, J. 2000. «Continuous mixing of solids». *Chemical Engineering and Technology*. 23 :1. 16 – 18.
- LECOMTE, V., APPERT-ROLLAND, C., VAN WIJLAND, F. 2005. «Chaotic properties of systems with Markov dynamics». *Physical Review Letters*. 95. 010601.
- LEE, K. C., YIANNESKIS, M. 1997. «A liquid crystal thermographic technique for the measurement of mixing characteristics in stirred vessels». *Chemical Engineering Research and Design*. 75. 746–754.
- LEMIEUX, M., BERTRAND, F., CHAOUKI, J., GOSSELIN, P. 2007. «Comparative study of the mixing of free-flowing particles in a V-blender and a bin-blender». *Chemical Engineering Science*. 62. 1783–1802.
- LEMIEUX, M., LEONARD, G., DOUCET, J., LECLAIRE, L.-A., BERTRAND, F., CHAOUKI, J. 2006. «Large scale numerical investigation of granular mixing in a V-blender using a discrete element method». *Accepted in Powder Technology*.
- LI, Y., XU, Y., THORNTON, C. 2005. «A comparison of discrete element simulations and experiments for sandpiles composed of spherical particles». *Powder Technology*. 160. 219–228.
- LIMTRAKUL, S., CHEN, J., RAMACHANDRAN, P. A., DUDUKOVIC, M. P. 2005. «Solids motion and holdup profiles in liquid fluidized beds». *Chemical Engineering Science*. 60 :7. 1889–1900.

- LUN, C. K. K., SAVAGE, S. B., JEFFREY, D. J., CHEPURNIY, N. 1984. «Kinetic theories for granular flow : inelastic particles in couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield». *Journal of Fluid Mechanics*. 140. 223–256.
- MASSON, S., MARTINEZ, J. 2000. «Effect of particle mechanical properties on silo flow and stresses from distinct element simulations». *Powder Technology*. 109 :1-3. 164–178.
- MEIER, Steven W., LUEPTOW, Richard M., OTTINO, Julio M. 2007. «A dynamical systems approach to mixing and segregation of granular materials in tumblers». *Advances in Physics*. 56 :5. 757 – 827.
- MELLMANN, J. 2001. «The transverse motion of solids in rotating cylinders forms of motion and transition behavior». *Powder Technology*. 118. 251–270.
- METCALFE, G., SHINBROT, T., MCCARTHY, J. J., OTTINO, J. M. 1995. «Avalanche mixing of granular solids». *Nature*. 374. 39–41.
- MOAKHER, M., SHINBROT, T., MUZZIO, F. J. 2000. «Experimentally validated computations of flow, mixing and segregation of non cohesive grains in 3D tumbling blenders». *Powder Technology*. 109. 58–71.
- MUZZIO, F. J., GOODRIDGE, C. L., ALEXANDER, A., ARRATIA, P., YANG, H., SUDAH, O., MERGEN, G. 2003. «Sampling and characterization of pharmaceutical powders and granular blends». *International Journal of Pharmaceutics*. 250. 51–64.
- O’SULLIVAN, Catherine, BRAY, Jonathan D. 2004. «Selecting a suitable time step for discrete element simulations that use the central difference time integration scheme». *Engineering Computations (Swansea, Wales)*. 21 :2-4. 278–303.

- OTTINO, J. M. 1989. *The kinematics of mixing : stretching, chaos and transport*. Cambridge Texts in Applied Mathematics.
- OTTINO, J. M., KHAKHAR, D. V. 2000. «Mixing and segregation of granular materials». *Annual review in Fluid Mechanics*. 32. 55–91.
- OTTINO, J. M., KHAKHAR, D. V. 2001. «Fundamental research in heaping, mixing, and segregation of granular materials : challenges and perspectives». *Powder Technology*. 121. 117–122.
- PAUL, E. L., ATIEMO-OBENG, V. A., KRESTA, S. M. 2003. *Handbook of Industrial Mixing*. Wiley Interscience.
- PINEAULT, G., CLOUTIER, L. 1972. «Fonction de transfert d'un reservoir agite en systeme continu : I. determination a l'aide d'un traceur fluorescent.» *Canadian Journal of Chemical Engineering*. 50. 736–742.
- RAPAPORT, D. C. 2007. «Simulated three-component granular segregation in a rotating drum». *Physical Review E*. 76. 041302.
- RIPPIE, E. G., CHOU, C. H. 1978. «Kinetics of mass transport in sheared particulate beds : Markov chains». *Powder Technology*. 21. 205–216.
- ROSENSTEIN, M. T., COLLINS, J. J., DE LUCA, C. 1993. «A practical method for calculating largest Lyapunov exponents from small data sets». *Physica D*. 65. 117–134.
- ROSENTHAL, J. S. 1995. «Convergence rates for Markov chains». *SIAM Review*. 37. 387–405.
- ROY, D., LARACHI, F., LEGROS, R., CHAOUKI, J. 1994. «Study of solid behavior in spouted

- beds using 3D particle tracking». *Canadian Journal of Chemical Engineering*. 72 :6. 945 – 952.
- ROY, S., LARACHI, F., AL-DAHANA, M. H., DUDUKOVIC, M. P. 2002. «Optimal design of radioactive particle tracking experiments for flow mapping in opaque multiphase reactors». *Applied Radiation and Isotopes*. 56. 485–503.
- RUELLE, D. 1978. *Thermodynamic formalism*. Addison-Wesley-Longman.
- RYCROFT, C. H., BAZANT, M. Z., GREST, G. S., LANDRY, J. W. 2006. «Dynamics of random packings in granular flow». *Physical Review E*. 73.
- SANAD, A. M., OOI, J. Y., HOLST, J. M. F. G., ROTTER, J. M. 2001. «Computations of granular flow and pressure in a flat-bottomed silo». *Journal of Engineering mechanics*. 127. 1033–1043.
- SAVAGE, S. B., JEFFREY, D. J. 1981. «The stress tensor in a granular flow at high shear rate». *Journal of Fluid Mechanics*. 110. 255–272.
- SHERRITT, R. G., CHAOUKI, J., MEHROTRA, A. K., BEHIE, L. A. 2003. «Axial dispersion in the three-dimensional mixing of particles in a rotating drum reactor.» *Chemical Engineering Science*. 58 :2. 401–415.
- SMITH, D. W. 2001. «Granular temperature». *The International Journal of Geomechanics*. 1. 41–63.
- SNYDER, B. J., GYOREY, G. L. 1965. «Calculating gamma efficiencies in scintillation detectors». *Nucleonics*. 23. 80–86.
- SOUVALIOTIS, A., JANA, S. C., OTTINO, J. M. 1995. «Potentialities and limitations of mixing simulations». *AIChE Journal*. 41. 1605–1621.

- SPROTT, J. C. 2003. *Chaos and Time-Series Analysis*. Oxford University Press.
- SUDAH, O. S. 2001. *Experimental and Numerical Investigation of Mixing and Segregation of Free Flowing and Cohesive Powders in GEA Gallay Tote Blenders*. Thèse de doctorat en, Rutgers, The State University of New Jersey.
- SUDAH, O. S., ARRATIA, P. E., ALEXANDER, A., MUZZIO, F. J. 2005. «Simulation and experiments of mixing and segregation in a tote blender». *AIChE Journal*. 51 :3. 836–844.
- SUNDARESAN, S., EATON, J., KOCH, D. L., OTTINO, J. M. 2003. «Appendix 2 : report of study group on disperse flow». *Internation Journal of Multiphase Flow*. 29. 1069–1087.
- TAKENS, F. 1981. *Lecture Notes in Mathematics*. Springer. vol. 898.
- THEILER, J. 1986. «Spurious dimension from correlation algorithms applied to limited time-series data». *Physical Review A*. 34. 2427–2432.
- VANDERPLAATS, G. N., «Conmin user's manual. nasa technical memorandum x-62282», 1978.
- VARGA, Richard S. 1962. *Matrix iterative analysis*. Prentice-Hall series in automatic computation.
- WIGGINS, S. 1990. *Introduction to Applied Nonlinear Dynamical Systems and Chaos*. Springer-Verlag.
- WIGGINS, S. 1992. *Chaotic Transport in Dynamical Systems*. Springer.
- WIGGINS, S., OTTINO, J. M. 2004. «Foundations of chaotic mixing». *Phil. Transaction of the Royal Society London A*. 362. 937–970.

ZHOU, Y. C., WRIGHT, B. D., YANG, R. Y., XU, B. H., YU, A. B. 1999. «Rolling friction in the dynamic simulation of sandpile formation». *Physica A*. 269. 536–553.

ZHU, H. P., YU, A. B. 2006. «Numerical investigation of unsteady state hopper flow». *Proceedings of the 5th World Congress on Particle Technology*.